

Stochastische Teilchensysteme
zur Approximation der
Koagulationsgleichung

D I S S E R T A T I O N

zur Erlangung des akademischen Grades
doctor rerum naturalium
(dr. rer. nat.)
im Fach Mathematik

eingereicht an der
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät II
Humboldt-Universität zu Berlin

von
Diplom-Mathematiker Andreas Eibeck
geboren am 12.03.1970 in Moers

Präsident der Humboldt-Universität zu Berlin:
Prof. Dr. Jürgen Mlynek

Dekan der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät II:
Prof. Dr. Elmar Kulke

Gutachter:

1. Prof. Dr. H. Babovsky
2. Prof. Dr. G. Kersting
3. PD Dr. W. Wagner

eingereicht am: 13.11.2001
Tag der mündlichen Prüfung: 24.05.2002

Abstract

Coagulation is an important physical process for a wide range of technical and scientific applications and denotes the pairwise merging of clusters with different mass. The dynamic behaviour of the cluster concentration can be described by Smoluchowski's coagulation equation which is an infinite system of nonlinear differential equations.

In this thesis we start with a nonlinear measure-valued equation generalizing the coagulation and other kinetic equations and integrating various physical and chemical processes. This equation allows a unified treatment of questions concerning existence of solutions and their approximation by means of stochastic particle systems. Here, the particle systems are defined as regular jump processes living on a set of point measures on a locally compact space.

The thesis consists of three parts: First of all, approximation and convergence results for suitable jump rates and increasing particle numbers are proved by means of compactness theorems, martingale techniques and localizing procedures. Then, an application to the coagulation equation with fragmentation, source and efflux terms leads to new existence results and stochastic algorithms. Finally, their numerical features and efficiency are compared to known Monte Carlo methods and their specific convergence properties are presented with respect to a phase transition which is called gelation and leads to a loss of total cluster mass.

Keywords:

coagulation, stochastic particle systems, convergence, Monte Carlo method

Zusammenfassung

Koagulation ist physikalisch bedeutsam für eine Vielzahl von technischen und naturwissenschaftlichen Anwendungen und bezeichnet die paarweise Verschmelzung von Clustern unterschiedlicher Masse. Der zeitliche Verlauf der Clusterkonzentration läßt sich durch Smoluchowskis Koagulationsgleichung beschreiben, einem unendlichen System nichtlinearer Differentialgleichungen.

Ausgangspunkt dieser Arbeit ist eine nichtlineare maßwertige Gleichung, die die Koagulations- und andere kinetische Gleichungen beinhaltet und verschiedene physikalische und chemische Mechanismen integriert. Sie ermöglicht einen allgemeinen Zugang zu Fragen bezüglich der Existenz von Lösungen und ihrer Approximation durch stochastische Partikelsysteme. Die Teilchensysteme werden dabei als reguläre Sprungprozesse modelliert, welche eine Menge diskreter Maße auf einem lokal-kompakten Raum als Zustandsraum besitzen.

Die Arbeit untergliedert sich in drei Teile: Unter geeigneten Voraussetzungen an die Sprungraten werden zunächst für wachsende Teilchenzahlen Approximations- und Konvergenzaussagen unter Verwendung von Kompaktheitsargumenten, Martingaltheoremen und Lokalisierungstechniken bewiesen. Ihre Anwendung auf die Koagulationsgleichung mit Fragmentation, Quellen und Senken erlaubt anschließend die Herleitung neuer Existenzresultate und stochastischer Algorithmen. Der letzte Abschnitt illustriert die numerischen Eigenschaften und die Effizienz der neuen Algorithmen im Vergleich zu bisherigen Monte Carlo Methoden und ihre besondere Eignung zur Analyse des Gelationsphänomens, einem Phasenübergang, welcher zum Masseverlust im Clustersystem führt.

Schlagwörter:

Koagulation, Stochastische Teilchensysteme, Konvergenz, Monte Carlo Methode

Danksagung

An erster Stelle möchte ich Priv.-Doz. Dr. Wolfgang Wagner und Prof. Dr. Hans Babovsky herzlich dafür danken, dass sie mir die Mitarbeit in dem DFG-Projekt „Stochastische Partikelsysteme als numerische Verfahren für Probleme der Aerosoldynamik“ ermöglicht und somit die Voraussetzungen für diese Arbeit geschaffen haben. Insbesondere danke ich Herrn Wagner für die äußerst engagierte Betreuung am Weierstraß-Institut und Herrn Babovsky für die vielen inspirierenden Gespräche bei meinen Besuchen in Ilmenau.

Für viele Anregungen danke ich Prof. Dr. Kersting bei meinem Aufenthalt in Frankfurt sowie meinem Kollegen Ingo Matheis. Der Deutschen Forschungsgemeinschaft danke ich für die finanzielle Unterstützung in den letzten vier Jahren. Nicht zuletzt gilt meiner Familie und meinen Freunden besonders herzlicher Dank für die seelisch-moralische Unterstützung während der Anfertigung dieser Arbeit.

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1 Stochastische Teilchenapproximation einer nichtlinearen Gleichung	7
1.1 Notation und grundlegende Begriffe	8
1.2 Minimaler Sprungprozeß	11
1.2.1 Konstruktion	11
1.2.2 Regularität und Martingaleigenschaften	15
1.3 Stochastisches Teilchensystem	20
1.4 Nichtlineare Gleichung und Konvergenz	23
1.4.1 Maßwertige Räume	27
1.4.2 Relative Kompaktheit	31
1.4.3 Charakterisierung schwacher Limiten	35
2 Anwendung auf die Koagulation-Fragmentationsgleichung	39
2.1 Koagulation-Fragmentationsprozeß	40
2.1.1 Approximationseigenschaften	42
2.1.2 Konvergenz und Gelation	45
2.2 Existenzresultate	49
2.2.1 Berücksichtigung von Quellen und Senken	49
2.2.2 Starke Fragmentation und Masseerhaltung	51
2.3 Mass-Flow-Prozeß	56
2.3.1 Unbeschränkter Typenraum	58
2.3.2 Beschränkter Typenraum	59
3 Numerische Analyse der Koagulationsgleichung	65
3.1 Stochastische Algorithmen	66

3.1.1	Direct-Simulation-Algorithmus	66
3.1.2	Mass-Flow-Algorithmus	72
3.1.3	Implementierung, Test und Anwendung	73
3.2	Numerischer Vergleich von DSA und MFA	76
3.2.1	Konvergenzeigenschaften	77
3.2.2	Laufzeitverhalten und Effizienz	80
3.2.3	Gelationsspezifische Untersuchungen	85
A	Skorohod-Raum und Meßbarkeit	98

Abbildungsverzeichnis

3.1	Approximation der Funktionale (3.17) und (3.18) für den Kern K_2 - links: DSA, rechts: MFA.	79
3.2	Normierter systematischer Fehler für $m_2(t)$ und Kern K_2 - links: DSA, rechts: MFA.	80
3.3	Quotient (3.24) für $m_2(t)$ und Kern K_2	80
3.4	Varianzkoeffizient (3.25) für $c(t, x)$, $1 \leq x \leq 400$ - links: Kern K_2 und $t = 30$, rechts: Kern K_1 und $t = 200$	81
3.5	Gesamtzahl der Sprünge (links) und relativer Anteil der fiktiven Sprünge (rechts) im Fall des DSA für den Kern K_3	82
3.6	Anteil erfolgloser Versuche zur Erzeugung eines Kollisionsclusters.	82
3.7	Mittlere Rechenzeit.	83
3.8	Konfidenzbänder für verschiedene Summenkonzentrationen (3.17) unter Verwendung des Kerns K_3 - links: DSA, rechts: MFA.	84
3.9	Varianz- und Laufzeitkoeffizient (3.27) bzw. (3.25) für den Kern K_2 und das zweite Moment.	85
3.10	Gewinnfaktor (3.26) für das zweite Moment und die Kerne K_2 (links) und K_1 (rechts).	85
3.11	MFA-Approximation der Summenkonzentration für $K(x, y) = xy$	86
3.12	Approximation der Gelmasse für $K(x, y) = xy$	87
3.13	Approximation der Gelmasse für die Kerne K_6 (links) und K_7 (rechts). . .	87
3.14	Approximation der Gelmasse für den Kern K_5 mit $a = 0.8$	89
3.15	Approximation der Summenkonzentration für den Kern K_5 mit $a = 0.8$ mittels DSA (durchgezogen) und MFA (gestrichelt).	89
3.16	Konfidenzbänder für verschiedene Summenkonzentrationen unter Verwendung des Kerns K_5 mit $a = 0.8$ - links: DSA, rechts: MFA.	90

Tabellenverzeichnis

3.1	Zur numerischen Analyse verwendete Koagulationskerne.	76
-----	---	----

Einleitung

Polydisperse Systeme bestehen aus in Gasen oder Flüssigkeiten suspendierten Partikeln, die sich in ihrer Größe, Morphologie, Zusammensetzung oder elektrischen Ladung unterscheiden. Ihre räumliche Bewegung resultiert aus mikroskopischen Wechselwirkungen mit dem Dispersionsmedium, aus internen Kräften wie elektrostatischer Anziehung gegensätzlich geladener Partikel und aus externen Kräften wie Gravitation und elektrischem Feld. Die Kollision zweier Partikel kann zur ihrer Verschmelzung und somit zur Formation eines neuen Teilchens führen. Dieser Prozeß wird Koagulation genannt und beeinflußt maßgeblich die Populationsverteilung und damit die physikalischen Eigenschaften des polydispersen Systems. Die Bedeutung dieses Mechanismus spiegelt sich in einer Reihe von Anwendungen aus den Bereichen Aerosolwissenschaft, Astronomie, Biologie, Medizin, Polymerchemie, Umweltschutz und Verfahrenstechnik wieder. Einige davon sollen in den folgenden Absätzen exemplarisch vorgestellt werden.

Bei Verbrennungsvorgängen in Motoren und industriellen Anlagen entstehen Partikel in sehr hoher Konzentration, die einen Durchmesser von wenigen Nanometern besitzen. In [55] werden Maßnahmen untersucht, die den Koagulationsprozeß und das Wachstum der Ruß- und Rauchgaspartikel beschleunigen und zu einer Effizienzsteigerung von Filterungsanlagen führen.

Emittierte Schadstoffpartikel und Teilchen wie Staub und Pollen, die in natürlicher Weise freigesetzt werden, wachsen durch unterschiedliche Prozesse wie Koagulation und oberflächenchemischen Reaktionen und stehen als Wolkenkondensationskeime zur Verfügung. Die entstehenden feinen Wassertröpfchen kollidieren infolge ihrer durch Gasmoleküle induzierten Bewegung und infolge unterschiedlicher Sinkgeschwindigkeiten. Aufgrund ihrer sphärischen Form spricht man bei der Verschmelzung zweier Tröpfchen auch von Koaleszenz. Der Durchmesser und die Konzentration der Tröpfchen beeinflussen die Strahlungsbilanz der Wolken und damit den Energiehaushalt der Erdatmosphäre.

Untersuchungen über Aerosole, d.h. über Mischungen aus Luft und flüssigen oder festen Partikeln mit geringem Volumenanteil, können also einen Beitrag zum Umweltschutz liefern und tragen zum tieferen Verständnis meteorologischer Vorgänge bei. Die Formation atmosphärischer Aerosolpartikel unter Koagulationsprozessen wird ausführlich in [22], [98] und [82, Kapitel 12] behandelt. Die künstliche Erzeugung von Aerosolen ist darüberhinaus wichtig in der Pharmazie und bei der industriellen Herstellung pulverförmiger Stoffe (siehe [55]).

Polymere sind Makromoleküle, die sich aus gleichen chemischen Bausteinen, sogenannten Monomeren, zusammensetzen. Ihre Koagulationsintensität läßt sich durch Einsatz

verschiedenartiger Lösungsmittel beeinflussen. Auf diese Art und Weise lassen sich z.B. polymere Kunststoffe mit nahezu beliebigen mechanischen Eigenschaften herstellen, von Flüssigkeiten über biegsames Polyethylen bis zu hartem Plexiglas (siehe [11]).

Derartige Mischungen aus Flüssigkeiten und festen Partikeln, deren räumliche Ausdehnung typischerweise zwischen 10^{-4} bis 10^{-1} Millimetern liegt, werden allgemein als Kolloide bezeichnet. Sie sind wesentlicher Bestandteil unseres täglichen Lebens und finden sich u.a. in Klebstoffen, Farben, Schmiermitteln, Lebensmitteln und Pharmazeutika. Die mathematische Beschreibung ihrer Partikelverteilung geht auf die grundlegenden Arbeiten [94] und [95] des Physikers Marian von Smoluchowski aus den Jahren 1916 und 1917 zurück und ist Ausgangspunkt dieser Dissertation.

Smoluchowskis Koagulationsgleichung

Smoluchowskis Untersuchung sphärischer Kolloidteilchen legt die Schlußfolgerung nahe, dass die Teilchen nahezu unabhängig voneinander mit einer zu ihrem Radius antiproportionalen Varianz diffundieren. Zwei Teilchen mit Radius r und s besitzen somit die relative Diffusivität $r^{-1} + s^{-1}$ und ihre Mittelpunkte zum Kollisionszeitpunkt den Abstand $r + s$. Diese Überlegungen führen schließlich zu der Koagulationsrate

$$K(x, y) = c(x^{-1/3} + y^{-1/3})(x^{1/3} + y^{1/3}), \quad (1)$$

wobei x und y die Molekülanzahl der beiden sphärischen Teilchen und c eine geeignete Konstante sei. Unter der Annahme einer homogenen Verteilung läßt sich der zeitliche Verlauf der Konzentration $c(t, x)$ aller x -Cluster, also aller aus x Molekülen zusammengesetzten Teilchen, durch Smoluchowskis Koagulationsgleichung

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} c(t, x) &= \frac{1}{2} \sum_{y=1}^{x-1} K(x-y, y) c(t, x-y) c(t, y) - \sum_{y=1}^{\infty} K(x, y) c(t, x) c(t, y) \\ c(0, x) &= c_0(x) \end{aligned} \quad (2)$$

beschreiben. Hierbei bezeichne $t \geq 0$ die Zeit und c_0 die Anfangskonzentration. Die Konzentration der x -Cluster nimmt durch Koagulation von Clustern der Größe $y < x$ und $x - y$ zu und durch Koagulation eines x -Clusters mit einem Cluster beliebiger Größe ab, woraus sich unmittelbar die Gewinn- und Verlustterme auf der rechten Seite der Gleichung (2) ergeben.

Smoluchowskis Koagulationsgleichung behält unter anderen physikalischen und technischen Voraussetzungen ihre Gültigkeit bei. Polymere beispielsweise besitzen eine kettenartige oder fraktale Struktur, die ihre Mobilität beeinflusst, und reagieren unter Umständen nicht bei jeder Kollision miteinander. Simulationen [92], [73] legen Koagulationsraten nahe, welche die Form (1) mit modellabhängigen, von $\pm 1/3$ verschiedenen Exponenten besitzen. In einfacheren Polymermodellen [49] wird vorausgesetzt, dass die Reaktivität eines x -Clusters proportional zur durchschnittlichen Anzahl an Monomeren ist, die sich an der Oberfläche des Clusters befinden.

Eine besondere Stellung nehmen die Arbeiten von Flory [36] und Stockmayer [90] über zyklensfreie Polymere ein. Ihre Annahme äquireaktiver Moleküle mit $n \geq 3$ identischen

Verbindungsbrücken entspricht dem Kern

$$K(x, y) = [(n-2)x + 2][(n-2)y + 2] , \quad (3)$$

welcher die exakte Lösung der Koagulationsgleichung im Fall einer monodispersen Anfangsbedingung $c_0 = \delta_1$ erlaubt (siehe [99], [102]). Die Gesamtmasse $\sum_{k=1}^{\infty} k c(t, k)$ dieser Lösung ist bis zum Zeitpunkt $t_g = [n(n-2)]^{-1}$ konstant (in Übereinstimmung damit, dass jedes Koagulationsereignis die Masse erhält) und danach überraschenderweise streng fallend. Dieser Phasenübergang wird üblicherweise mit der Formation eines unendlich großen Clusters erklärt, geht mit völlig neuen physikalischen Eigenschaften des realen Polymersystems einher und wird Gelation genannt.

In der Aerosolwissenschaft gebräuchliche Koagulationskerne führen in der Regel zu keinem Masseverlust und resultieren aus dem Partikelverhalten in turbulenten Strömungen oder unter dem Einfluß von Gravitations- und Reibungskräften und der kinetischen Bewegung der Gasmoleküle. Im allgemeinen reflektieren anwendungsspezifische Kerne also die räumliche Bewegung und Morphologie der Partikel und basieren auf physikalischen Argumenten, experimentellen Beobachtungen oder numerischen Simulationen. Lang und Nguyen [60] ist es jedoch gelungen, eine räumlich inhomogene Version der Koagulationsgleichung mit konstanten Raten aus einem System Brownscher Sphären mit gleicher Diffusivität und gleichem Radius mathematisch herzuleiten.

Die Koagulationsgleichung erweckt seit Jahrzehnten das rege Interesse von Naturwissenschaftlern mit unterschiedlichem Schwerpunkt. Aus mathematischer Sicht stellt sich die Frage nach Existenz, Eindeutigkeit und Masseerhaltung einer Lösung zu einem beliebigen nichtnegativen und symmetrischen Koagulationskern K . Da nur für wenige spezielle Kerne eine explizite Lösung bekannt ist, nehmen numerische Aspekte eine besondere Stellung ein.

Marcus-Lushnikov-Prozeß

Das stochastische Analogon zur Koagulationsgleichung ist ein kanonischer zeitkontinuierlicher Markovprozeß, zu dessen Konstruktion wir eine natürliche Zahl N wählen und den endlichen Zustandsraum aller ungeordneten Tupel $\{x_1, \dots, x_n\}$ betrachten, für die $x_i > 0$, $1 \leq i \leq n$, und $\sum_{i=1}^n x_i = N$ gilt. Jedes Clusterpaar x_i und x_j , $1 \leq i < j \leq n$, koaguliere mit der Rate

$$\frac{K(x_i, x_j)}{2N}$$

und führe somit zu der Zustandsänderung

$$\{x_1, \dots, x_n\} \rightarrow \{x_1, \dots, x_{i-1}, x_{i+1}, \dots, x_{j-1}, x_{j+1}, \dots, x_n, x_i + x_j\} .$$

Der zugehörige Teilchenzahlprozeß $ML^N(x, t)$, der die Zahl aller x -Cluster zur Zeit t angibt, erschien erstmals in [69] und wurde in [40] und [68] unter numerischen Gesichtspunkten untersucht. Wir übernehmen hier die Bezeichnung von Aldous [3] und nennen ML^N Marcus-Lushnikov-Prozeß.

Der Marcus-Lushnikov-Prozeß weist für einige spezielle Kerne einen engen Bezug zu anderen stochastischen Modellen auf. Eine Verwandtschaft besteht zum Beispiel für den Flory-Stockmayer-Kern (3) mit dem Perkulationsprozeß auf Bethe-Gittern, für den Produktkern $K(x, y) = xy$ mit Erdős und Rényis zufälligem Graphen [30] und für den konstanten Kern $K(x, y) = 1$ mit Kingmans Coalescent [54]. Trotz dieser Tatsache fand der allgemeine Koagulationsprozeß erst in jüngster Zeit zunehmende Aufmerksamkeit bei Stochastikern in Hinsicht auf eine mathematisch fundierte asymptotische Analyse.

Basierend auf Resultaten von Erdős und Rényi [30], läßt sich im Fall des Produktkerns für steigende Teilchenzahl $N \rightarrow \infty$ zeigen, dass der normierte Marcus-Lushnikov-Prozeß $N^{-1}ML^N(t)$ nur in der Prä-Gelationsphase gegen die Lösung der Koagulationsgleichung konvergiert. Es stellt sich daher die Frage, für welche allgemeine Klasse von Kernen ein schwaches Gesetz der großen Zahlen zu erwarten ist. Aldous gibt in [3] einen umfassenden Überblick über das Verhältnis zwischen dem deterministischen und stochastischen Koagulationsmodell und über damit zusammenhängende Fragestellungen. Insbesondere fordert er mit [3, Problem 10(a)] zum Beweis auf, dass der Marcus-Lushnikov-Prozeß in der Prä-Gelationsphase tatsächlich gegen die Lösung der Koagulationsgleichung konvergiert, falls der Kern der Bedingung

$$\lim_{x+y \rightarrow \infty} \frac{K(x, y)}{x y} = 0$$

genügt. Dieser Beweis ist mittlerweile erbracht worden (siehe [45], [50], [75], [26]). Darüberhinaus vermitteln Jeons Resultate [50] einen Eindruck über das Gelationsgeschehen im stochastischen Modell. Ein vollständiges Bild existiert allerdings nur für den Produktkern und Kerne der Form (3).

Überblick und Zusammenfassung der Ergebnisse

In praktischen Anwendungen wird die Koagulationsgleichung unter mehreren Gesichtspunkten verallgemeinert. So werden in [98, Abschnitt 3.7] zusätzliche Quell- und Abflußterme berücksichtigt und Cluster betrachtet, die aus verschiedenen chemischen Spezies zusammengesetzt sind oder durch kontinuierliche Größen beschrieben werden. Ein Koagulationsmodell mit allgemeinem Typenraum wird in [76] untersucht. Von weiterer Bedeutung ist die binäre bzw. multiple Fragmentation, bei der Cluster in zwei oder mehrere Teile zerfallen können. Sie spielt u.a. in der Polymerchemie [101] eine Rolle und in der Becker-Döring-Theorie [10], [83] bei der Modellierung von Kondensations- und Evaporationseffekten durch Aufnahme und Abgabe einzelner Moleküle.

Die obige Darstellung verdeutlicht, dass Koagulation eine Vielzahl analytischer, stochastischer und numerischer Fragen aufwirft. Dies trifft in stärkerem Maße auf komplexere Modelle zu. In der vorliegenden Dissertation wollen wir einige dieser Aspekte aufgreifen: Erstens werden wir das Verhältnis zwischen verallgemeinerten deterministischen und stochastischen Koagulationsmodellen untersuchen, die eine Integration praxisrelevanter physikalischer und chemischer Mechanismen zulassen. Zweitens werden wir uns mit der Existenz und Masseerhaltung von Lösungen im Rahmen der Koagulation-Fragmentationsgleichung (K-F-Gleichung) auseinandersetzen. Drittens werden wir effiziente stochastische Algorithmen zur approximativen Lösung der Koagulationsgleichung herleiten, ihre Konvergenzei-

genschaften miteinander vergleichen und zur Analyse des Gelationsphänomens verwenden. Dies legt eine Strukturierung der Dissertation in einen allgemeinen, einen anwendungsorientierten und einen numerischen Teil nahe. Wir stellen diese nun gemeinsam mit den neuen, teilweise bereits veröffentlichten Resultaten vor.

Das erste Kapitel befaßt sich mit einem Markovschen Sprungprozeß, dessen Dynamik allgemeine Kollisions-, Zerfalls- und Quellereignisse von Teilchen einschließt. Die Teilchen werden dabei als Punktmaße mit konstantem Gewicht N^{-1} auf einem metrischen, separablen und lokal-kompakten Typenraum dargestellt, mit dem sich beliebige anwendungsspezifische Eigenschaften wie z.B. Größe, Zusammensetzung oder Geschwindigkeit modellieren lassen. Je nach Ausprägung führt die Kollision zweier Teilchen somit zur Koagulation, chemischen Reaktion oder Geschwindigkeitsänderung. Dabei können verschiedene chemische und physikalische Prozesse miteinander kombiniert werden. Die Zerfallereignisse korrespondieren z.B. mit der Fragmentation von Polymerketten, beinhalten aber auch chemische Reaktionen innerhalb eines Aerosolpartikels oder dessen Entnahme aus dem System. Die Quellereignisse wiederum entsprechen der Injektion neuer Teilchen.

Das Teilchensystem konstruieren wir mithilfe des minimalen Sprungprozesses auf einem geeigneten maßwertigen Raum. Wir stellen ein Regularitätskriterium vor, welches darüberhinaus hilfreiche Abschätzungen für Austrittszeiten aus kompakten Mengen liefert und eine geeignete Lokalisierung des Teilchensystems ermöglicht. Die Anwendung von Martingaltechniken, die bereits in [96] im Zusammenhang mit der Boltzmanngleichung zum Einsatz kommen, versetzt uns schließlich in die Lage, die relative Kompaktheit der Teilchensysteme zu beweisen. Unter stärkeren Bedingungen lösen ihre schwachen Limiten fast sicher eine maßwertige Gleichung, die den zeitlichen Verlauf der Partikelkonzentration beschreibt und deren quadratische, lineare und konstante Terme aus den Kollisions-, Zerfalls- bzw. Quellereignissen hervorgehen.

Im zweiten Kapitel führen wir zunächst die K-F-Prozesse ein und wenden die bereitgestellten Approximationsresultate an. Wir greifen dabei die simultane Herangehensweise an den Fall diskreter und kontinuierlicher Clustergrößen aus unserer Arbeit [26] auf, in der eine künstliche und im Limes zurückgenommene Beschränkung der Teilchenzahl die Existenz der Teilchensysteme gewährleistet. Ähnliche Teilchensysteme werden u.a. von Guias [45] und Jeon [50] für die diskrete K-F-Gleichung und von Norris [75] für die kontinuierliche Koagulationsgleichung betrachtet. Der in Kapitel 1 gewählte Zugang über den minimalen Sprungprozeß ermöglicht darüberhinaus die problemlose Berücksichtigung von Quellen und Senken.

Im Fall reiner Koagulation entspricht unser Teilchensystem dem Marcus-Lushnikov-Prozeß. Die bekannten Resultate über das deterministische und stochastische Modell werden zusammenfassend dargestellt. Insbesondere liefern sie die Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen der Koagulationsgleichung und eine Charakterisierung sogenannter gelierender Kerne, die zu einem Masseverlust führen. In diesem Zusammenhang kommen wir nochmal auf die Konvergenz des Marcus-Lushnikov-Prozesses zurück.

Existenzresultate für die K-F-Gleichung werden in einer Vielzahl von Publikationen bewiesen (z.B. [74], [1], [86], [8], [23], [62]). Mittels der Teilchenapproximation erzielen wir unmittelbar neue Existenzresultate im kontinuierlichen Fall für eine Klasse unbeschränkter Koagulations- und Fragmentationsraten (siehe auch [26]) und im diskreten und kontinu-

ierlichen Fall unter Hinzunahme von Quellen und Senken. Weiterhin erlaubt die Dualität von Fragmentation und Koagulation die Masseerhaltung für gelierende Kerne durch Anhebung der Fragmentationsintensität. Eine geeignete Balance zwischen dem linearen und dem quadratischen Term führt zu einer Verallgemeinerung von da Costas Theorem in [18] über die Existenz masseerhaltender Lösungen.

Anschließend interpretieren wir auf neue Weise eine modifizierte Koagulationsgleichung, die bereits in [5] Ausgangspunkt zur Herleitung eines zeitdiskreten Partikelverfahrens ist, und stellen die Approximationseigenschaften des resultierenden Teilchensystems vor (siehe [28]). Im Fall nichtgelierender Kerne zeichnet sich dieses alternative Modell durch eine konstante Partikelzahl aus, welche einerseits für numerische Belange besonders vorteilhaft ist und andererseits gemäß [19], [20] asymptotische Aussagen über die stochastische Dynamik eines fixierten Teilchens ermöglicht.

Im dritten Kapitel untersuchen wir die Koagulationsgleichung und das Gelationsphänomen unter numerischen Gesichtspunkten für Kerne, die teilweise in Anwendungen aus der Aerosolwissenschaft und Polymerchemie zum Einsatz kommen. Wir präsentieren dabei einen Querschnitt der in [27], [28] und [29] publizierten Ergebnisse.

Monte-Carlo-Methoden spielen bei der Approximation der Koagulationsgleichung eine bedeutende Rolle (siehe z.B. [41], [21], [86], [79], [57], [5]). Die Einführung fiktiver Sprünge und die Anwendung der Acceptance-Rejection-Methode erlauben uns die Herleitung neuer stochastischer Algorithmen zur effizienten Realisierung sowohl des Koagulations- als auch des modifizierten Prozesses. Eine Analyse der systematischen und statistischen Fehler sowie des Laufzeitverhaltens ergibt in der Prä-Gelationsphase die Verringerung des systematischen Fehlers durch das alternative Verfahren und verdeutlicht dessen Varianz reduzierenden und Effizienz steigernden Eigenschaften.

Darüberhinaus ist der modifizierte Prozeß geeignet zur näherungsweisen Bestimmung der Gelmasse und läßt einen expliziten Bezug zwischen der Explosion einzelner Teilchen und dem Masseverlust erkennen. Finite-Size-Effekte des masseerhaltenden Koagulationsprozesses sind dagegen für einen erheblichen systematischen Fehler in der Post-Gelationsphase verantwortlich und kommen selbst bei Verwendung sehr großer Teilchenzahlen zum Tragen. Spekulationen (z.B. in [86], [50], [2], [3, Abschnitt 5.2]) über die Identifikation des maximalen Clusters mit der Gelmasse gehen auseinander und basieren zum Teil auf einem asymptotischen Resultat von Erdős und Rényi, dem zufolge die größte Zusammenhangskomponente des zufälligen Graphen oberhalb eines kritischen Wertes die Größenordnung des Systems annimmt. Dies motiviert uns abschließend zu einer numerischen Untersuchung der Hypothese, dass der Phasenübergang bei allgemeinen gelierenden Kernen tatsächlich mit der Formation eines in diesem Sinne unendlich großen Clusters korrespondiert.

Kapitel 1

Stochastische Teilchenapproximation einer nichtlinearen Gleichung

Die Koagulationsgleichung ist eine nichtlineare Gleichung, die die Formation eines neuen Teilchens durch Kollision zweier Teilchen beschreibt. Die einzelnen Teilchen werden dabei durch ihre diskrete oder kontinuierliche Größe und die Koagulationsraten durch einen nichtnegativen, symmetrischen Kern charakterisiert. Die Koagulationsgleichung mit einem zufälligen Kern auf einem allgemeinen Typenraum wird bereits in [76] mathematisch behandelt. Darüberhinaus werden in einer Vielzahl von Anwendungen zusätzliche Fragmentations-, Quell- und Abflußterme betrachtet.

Die Boltzmann-Gleichung, die 1872 von Ludwig E. Boltzmann hergeleitet wurde, ist fundamental für die kinetische Gastheorie und beschreibt das Verhalten von Gasmolekülen, die ihre Geschwindigkeiten infolge einer Kollision ändern. Ein ausführlicher Überblick unter Berücksichtigung stochastischer Partikelmethoden findet sich in [4]. In der modernen Gastheorie werden mittlerweile komplexere Modelle untersucht, die u.a. allgemeine Teilcheneigenschaften, Koagulationsprozesse und chemische Reaktionen in Gasgemischen einbeziehen (siehe z.B. [96], [85], [67], [42]).

In diesem Kapitel wählen wir einen Zugang, der sowohl die Koagulationsgleichung und die homogene Boltzmann-Gleichung als auch deren Erweiterungen umfaßt, und stellen eine maßwertige nichtlineare Gleichung vor, welche die Populationsdynamik unter allgemeinen Kollisions-, Zerfalls- und Quellereignissen beschreibt. Die Intensität der verschiedenen Ereignisse wird dabei durch geeignete zustandsabhängige Raten spezifiziert.

Im Gegensatz zum Marcus-Lushnikov-Prozeß wird das zugehörige stochastische Teilchensystem auf einem unendlichen Zustandsraum diskreter Maße realisiert, bei dem die einzelnen Teilchen als Punktmaße repräsentiert werden. Sein Verhalten ergibt sich aus den Ereignisraten in der nichtlinearen Gleichung und seine Konstruktion erfolgt mittels des minimalen Sprungprozesses, für den wir ein geeignetes Regularitätskriterium zur Verfügung stellen. Martingaleigenschaften und Lokalisierungstechniken helfen uns, die wesentlichen Approximationseigenschaften des stochastischen Teilchensystems und seine Konvergenz gegen die eindeutige Lösung der nichtlinearen Gleichung zu beweisen.

1.1 Notation und grundlegende Begriffe

Wir beginnen mit der Notation und einer kurzen Vorstellung von topologischen und stochastischen Objekten, die grundlegend für diese Arbeit sind.

Sei (E, \mathcal{B}) ein meßbarer Raum und $M(E)$ ($B(E)$) die Menge aller meßbaren (und beschränkten) Funktionen. Die Supremum-Norm auf $B(E)$ sei durch $\|\cdot\|$ gegeben und die Indikatorfunktion bzgl. der Menge $B \in \mathcal{B}$ durch 1_B . Eine Funktion $\lambda : E \times \mathcal{B}_2 \rightarrow [0, \infty]$ heißt Kern von E in den meßbaren Raum (E_2, \mathcal{B}_2) , falls

$$\lambda(\cdot, B) \in M(E), \quad B \in \mathcal{B}_2,$$

und

$$\lambda(\xi, \cdot) \text{ ist ein Maß auf } \mathcal{B}_2 \text{ für jedes } \xi \in E.$$

Sei (E, \mathcal{T}) ein topologischer Raum. In diesen Fall betrachten wir die Borel- σ -Algebra $\mathcal{B}(E)$ auf E und bezeichnen die Menge aller stetigen (und beschränkten) Funktionen auf E mit $C(E)$ ($C_b(E)$). $C_c(E)$ sei die Menge aller stetigen Funktionen mit kompaktem Träger. Ein Kern $\lambda : E \times \mathcal{B}(E) \rightarrow [0, \infty]$ auf E heißt beschränkt, falls

$$\sup_{\xi \in E} \lambda(\xi, E) < \infty,$$

und kompakt-beschränkt, falls

$$\sup_{\xi \in C} \lambda(\xi, E) < \infty, \quad C \subset E \text{ kompakt}.$$

Weiterhin bezeichne $\mathcal{P}(E)$ die Menge aller Wahrscheinlichkeitsmaße auf E und δ_ξ das Dirac-Maß auf $\xi \in E$. Für die Konvergenz in Verteilung einer Folge von E -wertigen Zufallsvariablen benutzen wir das Symbol \Rightarrow .

cadlag-Prozesse

Sei E ein metrischer Raum. Die Abbildung $\xi : [0, \infty) \rightarrow E$ heißt cadlag-Pfad in E , falls ξ rechtsstetig ist und sämtliche linksseitigen Grenzwerte existieren. $D([0, \infty), E)$ bezeichne den Skorohod-Raum, d.h. den Raum aller cadlag-Pfade in E , versehen mit der Skorohod-Topologie (siehe [33, Abschnitt 3.5]). Lemma A.1 gibt eine äquivalente Beschreibung der Konvergenz bzgl. der Skorohod-Topologie. $D([0, \infty), E)$ ist ein metrischer Raum und nach [33, Theorem 3.5.6] ist $D([0, \infty), E)$ separabel, falls E separabel ist. $C([0, \infty), E)$ bezeichne den Unterraum aller stetigen Pfade.

Im folgenden verstehen wir unter einem Prozeß immer einen stochastischen Prozeß. Der E -wertige Prozeß $X = \{X(t)\}_{t \geq 0}$ sei auf dem Wahrscheinlichkeitsraum (Ω, \mathcal{F}, P) definiert. Wir vereinbaren die Sprechweise, dass X eine bestimmte Eigenschaft pfadweise besitzt, wenn diese Eigenschaft auf $X(\omega, \cdot)$ für jedes $\omega \in \Omega$ zutrifft. X ist z.B. cadlag oder heißt cadlag-Prozeß, falls $X(\omega, \cdot) \in D([0, \infty), E)$ für jedes $\omega \in \Omega$. Ist E separabel, so läßt sich gemäß [33, Proposition 3.7.1] jeder cadlag-Prozeß als $D([0, \infty), E)$ -wertige Zufallsvariable auffassen. Im Anhang sind weitere Meßbarkeitsaussagen über cadlag-Prozesse und über einige Abbildungen zusammengefaßt, auf die wir zu gegebener Zeit zurückgreifen werden.

Martingale

Für eine Indexmenge I und beliebige Abbildungen $Y(i) : \Omega \rightarrow E, i \in I$, sei $\sigma(Y(i) : i \in I)$ die von den Abbildungen $Y(i)$ erzeugte σ -Algebra auf Ω . Eine Familie $\{\mathcal{F}_t\} = \{\mathcal{F}_t\}_{t \geq 0}$ von σ -Algebren heißt Filtration, falls $\mathcal{F}_s \subset \mathcal{F}_t \subset \mathcal{F}, 0 \leq s \leq t$. X ist $\{\mathcal{F}_t\}$ -adaptiert, falls $X(t)$ für jedes $t \geq 0$ \mathcal{F}_t -meßbar ist. $\{\mathcal{F}_t^X\}$ bezeichne die von X erzeugte Filtration, d.h. $\mathcal{F}_t^X = \sigma(X(s) : 0 \leq s \leq t)$. Eine $[0, \infty]$ -wertige Zufallsvariable τ heißt $\{\mathcal{F}_t\}$ -Stoppzeit, falls

$$\{\tau \leq t\} \in \mathcal{F}_t, \quad t \geq 0.$$

Ein reellwertiger Prozeß M ist ein $\{\mathcal{F}_t\}$ -Martingal, falls M $\{\mathcal{F}_t\}$ -adaptiert ist, $\mathbb{E}|M(t)| < \infty, t \geq 0$, und

$$\mathbb{E}[M(t)|\mathcal{F}_s] = M(s), \quad t \geq s \geq 0.$$

M ist ein $\{\mathcal{F}_t\}$ -lokales Martingal, falls es $\{\mathcal{F}_t\}$ -Stoppzeiten $\tau_1 \leq \tau_2 \leq \dots$ gibt, so dass fast sicher $\tau_m \rightarrow \infty$ und für jedes $m \geq 1$ $M(\cdot \wedge \tau_m)$ ein $\{\mathcal{F}_t\}$ -Martingal ist.

Bemerkung 1.1 Sei M ein reellwertiger, $\{\mathcal{F}_t\}$ -adaptierter Prozeß, für den $\mathbb{E}|M(t)| < \infty, t \geq 0$, gilt. Dann ist M genau dann ein $\{\mathcal{F}_t\}$ -Martingal, wenn

$$\mathbb{E}[M(t) - M(s)]1_A = 0, \quad 0 \leq s \leq t, A \in \mathcal{F}_s.$$

Lemma 1.2 Sei E ein metrischer Raum und X ein E -wertiger Prozeß. Sei M ein reellwertiger, $\{\mathcal{F}_t^X\}$ -adaptierter Prozeß, für den $\mathbb{E}|M(t)| < \infty, t \geq 0$, gilt. Dann ist M genau dann ein $\{\mathcal{F}_t^X\}$ -Martingal, wenn

$$\mathbb{E} \left[(M(t) - M(s)) \prod_{i=1}^n 1_{B_i}(X(s_i)) \right] = 0 \quad (1.1)$$

für alle $n \geq 1, 0 \leq s_1 \leq \dots \leq s_n \leq s \leq t$ und $B_1, \dots, B_n \in \mathcal{B}(E)$.

Beweis. Falls M ein $\{\mathcal{F}_t^X\}$ -Martingal ist, folgt (1.1) direkt aus Bemerkung 1.1. Um die andere Richtung zu zeigen, wählen wir $0 \leq s \leq t$ und definieren die beschränkten Maße μ^+ und μ^- auf \mathcal{F}_s^X durch

$$\mu^+(A) = \mathbb{E}[\max\{M(t) - M(s), 0\} 1_A], \quad \mu^-(A) = \mathbb{E}[\max\{M(s) - M(t), 0\} 1_A].$$

Das System von Ereignissen

$$\mathcal{E} = \left\{ \{X(s_1) \in B_1, \dots, X(s_n) \in B_n\} : n \geq 1, 0 \leq s_1 \leq \dots \leq s_n \leq s, B_i \in \mathcal{B}(E) \right\}$$

ist \cap -stabil und erzeugt die σ -Algebra \mathcal{F}_s^X . Nach Voraussetzung (1.1) gilt

$$\mu^+(A) = \mu^-(A), \quad A \in \mathcal{E},$$

und aus [9, Theorem 5.4] folgt

$$\mathbb{E}[M(t) - M(s)]1_A = \mu^+(A) - \mu^-(A) = 0, \quad A \in \mathcal{F}_s^X.$$

□

Lokal-kompakte Räume

Ein Hausdorff-Raum (E, \mathcal{T}) heißt lokal-kompakt, falls jeder Punkt eine kompakte Umgebung besitzt, d.h., falls

$$\forall \xi \in E \quad \exists O \text{ offen, } C \text{ kompakt} \quad : \quad \xi \in O \subset C .$$

Sei (E, \mathcal{T}) ein lokal-kompakter Raum und $\Delta \notin E$. Dann ist der Raum $E^\Delta = E \cup \{\Delta\}$ bzgl. der Topologie

$$\mathcal{T}^\Delta = \mathcal{T} \cup \{E^\Delta \setminus C : C \subset E \text{ kompakt}\}$$

kompakt. $(E^\Delta, \mathcal{T}^\Delta)$ wird (Alexandrovsche) Einpunkt-Kompaktifizierung genannt (siehe [9, S.191]). Aus der Definition von \mathcal{T}^Δ erhalten wir für die Folge $\xi_k \in E$, $k \geq 1$, die Äquivalenz

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \xi_k = \Delta \quad \Leftrightarrow \quad \#\{k : \xi_k \in C\} < \infty, \quad C \subset E \text{ kompakt} .$$

Falls E metrisch, separabel und lokal-kompakt ist, sind nach [9, Bemerkung 29.4]) sowohl E als auch E^Δ Polnisch. Wir geben nun weitere Aussagen über lokal-kompakte Räume wieder, die im Rahmen dieser Arbeit eine wichtige Rolle spielen, und beginnen mit der Charakterisierung der Menge $C_0(E)$, dem Abschluß von $C_c(E)$ in $C_b(E)$ bzgl. der Supremum-Norm $\|\cdot\|$.

Theorem 1.3 ([9, Theorem 27.6]) *Sei E lokal-kompakt. Dann liegt Ψ genau dann in $C_0(E)$, wenn $\Psi \in C(E)$ und $\{\xi \in E : |\Psi(\xi)| \geq \epsilon\}$ für jedes $\epsilon > 0$ kompakt ist.*

Theorem 1.4 ([9, Theorem 27.2]) *Sei E lokal-kompakt und C und O kompakte bzw. offene Teilmengen, so dass $C \subset O$. Dann gibt es eine Funktion $\Psi \in C_c(E)$, für die*

$$\Psi(\xi) = 1, \xi \in C, \quad \Psi(\xi) = 0, \xi \notin O, \quad \text{und} \quad 0 \leq \Psi(\xi) \leq 1, \xi \in E .$$

Theorem 1.5 *Sei E metrisch, separabel und lokal-kompakt. Dann gibt es kompakte und offene Teilmengen C_m und O_m , $m \geq 1$, so dass*

$$E = \bigcup_{m=1}^{\infty} C_m \quad \text{und} \quad C_m \subset O_m \subset C_{m+1}, \quad m \geq 1 . \quad (1.2)$$

Beweis. Der Beweis ergibt sich direkt aus [9, Beispiel 29.2(iii)] und [9, Lemma 29.8].
□

Bemerkung 1.6 *Angenommen C_m und O_m sind kompakte und offene Mengen, die der Bedingung (1.2) genügen. Dann ist $\{O_m\}_{m=1}^{\infty}$ eine offene Überdeckung von E und es folgt sofort*

$$\forall C \subset E \text{ kompakt} \quad \exists m \quad : \quad C \subset C_m .$$

Nach Theorem 1.4 existieren Funktionen $e_m \in C_c(E)$, $m \geq 1$, mit der Eigenschaft

$$e_m(\xi) = 1, \xi \in C_m, \quad e_m(\xi) = 0, \xi \notin O_m, \quad \text{und} \quad 0 \leq e_m(\xi) \leq 1, \xi \in E . \quad (1.3)$$

1.2 Minimaler Sprungprozeß

In diesem Abschnitt entwickeln wir die theoretischen Grundlagen zur Approximation der nichtlinearen Gleichung durch stochastische Teilchensysteme. Dazu konstruieren wir einen Markovschen Sprungprozeß mit geeigneten Pfad- und Martingaleigenschaften und stellen Abschätzungen vor, mit denen das stochastische Verhalten der Teilchensysteme kontrolliert und ihre relative Kompaktheit gezeigt werden kann.

Die Dynamik des Sprungprozesses wird durch einen kompakt-beschränkten Kern auf einem lokal-kompakten Zustandsraum charakterisiert. Im Fall eines unbeschränkten Kerns ist es möglich, dass der Prozeß explodiert, d.h. mit positiver Wahrscheinlichkeit in endlicher Zeit unendlich oft springt und gegen den kompaktifizierenden Punkt Δ konvergiert. Wir konstruieren den Sprungprozeß in der Weise, dass er nach dem Explosionszeitpunkt den absorbierenden Zustand Δ annimmt, und wollen ihn in diesem Sinne als minimal bezeichnen.

Der Sprungprozeß wird regulär genannt, falls er nicht explodiert. Die Frage der Regularität ist eng mit der Eindeutigkeit der Lösung der entsprechenden Kolmogorov-Gleichungen verbunden und eine notwendige und hinreichende Regularitätsbedingung läßt sich mithilfe der eingebetteten Markovkette formulieren (siehe z.B. [17, II.18,19] für den Fall eines abzählbaren Zustandsraums). Diese Bedingung ist im allgemeinen jedoch sehr schwer nachzuprüfen. Aus diesem Grund wählen wir ein geeignetes Kriterium aus [16], welches die Eindeutigkeit der Lösung garantiert, und adaptieren es zum Beweis der Regularität des minimalen Sprungprozesses.

1.2.1 Konstruktion

Wir konstruieren den Prozeß gemäß [33, S.163 und Problem 4.11.15]) und setzen dazu voraus, dass E ein metrischer, separabler und lokal-kompakter Raum und λ ein kompakt-beschränkter Kern auf E ist. Weiterhin sei E^Δ die Einpunkt-Kompaktifizierung von E und $\nu_0 \in \mathcal{P}(E)$. Sei $Z = \{Z_k\}_{k=0}^\infty$ eine Markovkette mit Zustandsraum E zur Anfangsverteilung ν_0 und Übergangsfunktion $p : E \times \mathcal{B}(E) \rightarrow [0, 1]$, wobei p gegeben sei durch

$$p(\xi, B) = \begin{cases} \frac{\lambda(\xi, B)}{\lambda(\xi, E)} & : \lambda(\xi, E) > 0, \\ 1_B(\xi) & : \lambda(\xi, E) = 0. \end{cases} \quad (1.4)$$

T_0, T_1, \dots seien unabhängige, zur Rate 1 exponentialverteilte Zufallsvariablen, die darüberhinaus unabhängig von Z seien. Da das Ereignis $\{\sum_{k=0}^\infty T_k < \infty\}$ eine Nullmenge ist, können wir o.E. annehmen, dass der zugrundeliegende Wahrscheinlichkeitsraum (Ω, \mathcal{F}, P) der Bedingung

$$\sum_{k=0}^\infty T_k(\omega) = \infty, \quad \omega \in \Omega, \quad (1.5)$$

genügt. Diese Annahme ist nicht wesentlich für die Konstruktion des minimalen Sprungprozesses, impliziert aber geeignete Pfadeigenschaften. Wir definieren die Sprung- und

Explosionszeiten durch

$$\tau_0 = 0, \quad \tau_l = \sum_{k=0}^{l-1} \frac{T_k}{\lambda(Z_k, E)}, \quad l \geq 1, \quad \text{und} \quad \tau_\infty = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{T_k}{\lambda(Z_k, E)}, \quad (1.6)$$

wobei wir $T_k/0 = \infty$ setzen. Der durch

$$X^\Delta(t) = \begin{cases} Z_l & : \tau_l \leq t < \tau_{l+1} \\ \Delta & : t \geq \tau_\infty \end{cases}$$

gegebene Prozeß heißt dann minimaler Sprungprozeß bzgl. λ und ν_0 .

Lemma 1.7 X^Δ ist ein E^Δ -wertiger Prozeß.

Beweis. Da $\lambda(\cdot, E)$ meßbar ist, sind τ_l , $l \geq 0$, und τ_∞ $[0, \infty]$ -wertige Zufallsvariablen. Man beachte, dass

$$\mathcal{B}(E^\Delta) = \mathcal{B}(E) \cup \{B \cup \{\Delta\} : B \in \mathcal{B}(E)\}.$$

Für $B \in \mathcal{B}(E)$ und $t \geq 0$ erhalten wir

$$\{X^\Delta(t) \in B\} = \bigcup_{l=0}^{\infty} \{\tau_l \leq t < \tau_{l+1}\} \cap \{Z_l \in B\} \in \mathcal{F}$$

und

$$\{X^\Delta(t) \in B \cup \{\Delta\}\} = \{X^\Delta(t) \in B\} \cup \{t \geq \tau_\infty\} \in \mathcal{F},$$

d.h., X^Δ ist ein stochastischer Prozeß. \square

Ein E -wertiger Prozeß X heißt Sprungprozeß, falls

$$\forall t \geq 0, \omega \in \Omega \quad \exists \epsilon > 0 \quad : \quad X(\omega, s) = X(\omega, t), \quad t \leq s < t + \epsilon. \quad (1.7)$$

In diesem Fall ist die Austrittszeit aus einer beliebigen Menge $B \in \mathcal{B}(E)$

$$\sigma_B^X = \inf \{t \geq 0 : X(t) \notin B\} \quad (1.8)$$

eine $\{\mathcal{F}_t^X\}$ -Stoppzeit, da nach (1.7)

$$\{\sigma_B^X \leq t\} = \bigcup_{s \in \mathbb{Q} \cap [0, t]} \{X(s) \notin B\} \cup \{X(t) \notin B\} \in \mathcal{F}_t^X, \quad t \geq 0.$$

Der minimale Sprungprozeß ist nach Konstruktion tatsächlich ein (E^Δ -wertiger) Sprungprozeß. Jeder Sprungprozeß ist rechtsstetig, im allgemeinen aber nicht cadlag. Durch Stoppen des minimalen Sprungprozesses mittels der $\{\mathcal{F}_t^{X^\Delta}\}$ -Stoppzeit

$$\sigma_B^\Delta = \inf \{t \geq 0 : X^\Delta(t) \notin B\} \quad (1.9)$$

läßt sich die cadlag-Pfadeigenschaft jedoch erzwingen.

Lemma 1.8 *Sei $B \in \mathcal{B}(E)$.*

(1) *Für jedes $s \geq 0$ und $A \in \mathcal{F}_s^{X^\Delta}$ gilt*

$$A \cap \{\sigma_B^\Delta > s\} \in \sigma(X^\Delta(u \wedge \sigma_B^\Delta) : 0 \leq u \leq s). \quad (1.10)$$

(2) *Falls $\sup_{\xi \in B} \lambda(\xi, E) < \infty$, dann ist $X^\Delta(\cdot \wedge \sigma_B^\Delta)$ ein E -wertiger Sprungprozeß mit cadlag-Pfaden.*

Beweis. (1) Sei $s \geq 0$, $A \in \mathcal{F}_s^{X^\Delta}$ und $\tau = s \wedge \sigma_B^\Delta$. Aus

$$A \cap \{\sigma_B^\Delta > s\} \cap \{\tau \leq u\} = \begin{cases} \emptyset & : u < s \\ A \cap \{\sigma_B^\Delta > s\} & : u \geq s \end{cases}$$

folgt $A \cap \{\sigma_B^\Delta > s\} \cap \{\tau \leq u\} \in \mathcal{F}_u^{X^\Delta}$ für jedes $u \geq 0$, d.h., das Ereignis $A \cap \{\sigma_B^\Delta > s\}$ ist in der σ -Algebra

$$\mathcal{F}_\tau = \left\{ B \in \mathcal{F} : B \cap \{\tau \leq u\} \in \mathcal{F}_u^{X^\Delta}, u \geq 0 \right\}$$

enthalten. Da X^Δ ein Sprungprozeß ist, können wir [12, Theorem A2.T28] anwenden und erhalten

$$\mathcal{F}_\tau = \sigma(X^\Delta(u \wedge \tau) : u \geq 0)$$

und somit (1.10).

(2) $X^\Delta(\cdot \wedge \sigma_B^\Delta)$ ist ein E^Δ -wertiger Sprungprozeß. Sei $\omega \in \Omega$. Falls $\tau_\infty(\omega) = \infty$, so gilt offensichtlich $X^\Delta(\omega, \cdot \wedge \sigma_B^\Delta) \in D([0, \infty), E)$. Nun gelte $\tau_\infty(\omega) < \infty$. Falls $Z_k(\omega) \in B$ für jedes $k \geq 0$, für welches $T_k(\omega) > 0$, so würde aus der Voraussetzung $\sup_{\xi \in B} \lambda(\xi, E) < \infty$ und der Annahme (1.5) folgen, dass

$$\tau_\infty(\omega) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{T_k(\omega)}{\lambda(Z_k(\omega), E)} \geq \frac{1}{\sup_{\xi \in B} \lambda(\xi, E)} \sum_{k=0}^{\infty} T_k(\omega) = \infty.$$

Also muß es ein k geben, für das sowohl $T_k(\omega) > 0$ als auch $Z_k(\omega) \notin B$ und somit $\sigma_B^\Delta(\omega) \leq \tau_k(\omega)$ gilt, woraus sich wiederum $X^\Delta(\omega, \cdot \wedge \sigma_B^\Delta) \in D([0, \infty), E)$ ergibt. \square

Wir kommen nun zu den Martingaleigenschaften des gestoppten minimalen Sprungprozesses. Dazu betrachten wir zu dem kompakt-beschränkten Kern λ den Operator \mathcal{A} , gegeben durch

$$\mathcal{A}\Psi(\xi) = \int_E [\Psi(\xi_2) - \Psi(\xi)] \lambda(\xi, d\xi_2), \quad \xi \in E, \quad (1.11)$$

auf dem Definitionsbereich $\mathcal{D}(\mathcal{A})$ aller Funktionen $\Psi \in M(E)$ mit der Eigenschaft

$$\Psi \text{ und } \int_E |\Psi(\xi_2)| \lambda(\cdot, d\xi_2) \text{ sind beschränkt auf kompakten Mengen.} \quad (1.12)$$

Es gilt $B(E) \subset \mathcal{D}(\mathcal{A})$ und nach Lemma A.5 $\mathcal{A}\Psi \in M(E)$ für jedes $\Psi \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$.

Lemma 1.9 *Sei $B \in \mathcal{B}(E)$, so dass $\sup_{\xi \in B} \lambda(\xi, E) < \infty$, $\Psi \in C_b(E)$ und M^Δ der (nach Lemma 1.8(2) wohldefinierte) Prozeß*

$$M^\Delta(t) = \Psi(X^\Delta(t \wedge \sigma_B^\Delta)) - \Psi(X^\Delta(0)) - \int_0^{t \wedge \sigma_B^\Delta} \mathcal{A}\Psi(X^\Delta(s)) ds, \quad t \geq 0. \quad (1.13)$$

Dann ist M^Δ ein $\{\mathcal{F}_t^{X^\Delta}\}$ -Martingal und es gilt

$$\mathbb{E} [M^\Delta(t)]^2 = \mathbb{E} \int_0^{t \wedge \sigma_B^\Delta} [\mathcal{A}\Psi^2 - 2\Psi \mathcal{A}\Psi] (X^\Delta(s)) ds.$$

Beweis. Wir definieren den beschränkten Kern

$$\tilde{\lambda}(\xi, A) = 1_B(\xi) \lambda(\xi, A), \quad \xi \in E, A \in \mathcal{B}(E),$$

und den beschränkten Operator

$$\tilde{\mathcal{A}} : C_b(E) \rightarrow B(E), \quad \tilde{\mathcal{A}}\Psi(\xi) = \int_E [\Psi(\xi_2) - \Psi(\xi)] \tilde{\lambda}(\xi, d\xi_2) = 1_B(\xi) \mathcal{A}\Psi(\xi).$$

Sei $\sigma_B^Z = \min\{k \geq 0 : Z_k \notin B\}$. Dann ist $Z_{\cdot \wedge \sigma_B^Z}$ eine Markovkette mit Anfangsverteilung ν_0 und Übergangsfunktion (1.4), wobei λ durch $\tilde{\lambda}$ zu ersetzen ist. Offensichtlich ist $X(\cdot) := X^\Delta(\cdot \wedge \sigma_B^\Delta)$ der minimale Sprungprozeß bzgl. $\tilde{\lambda}$ und ν_0 . Gemäß [33, S.162-164] und [33, Proposition 4.1.7] ist

$$M(t) = \Psi(X(t)) - \Psi(X(0)) - \int_0^t \tilde{\mathcal{A}}\Psi(X(s)) ds$$

ein $\{\mathcal{F}_t^X\}$ -Martingal für beliebiges $\Psi \in C_b(E)$. Sei σ_B^X gegeben durch (1.8). Es gilt

$$\sigma_B^\Delta = \sigma_B^X \quad \text{und} \quad M^\Delta(t) = M(t \wedge \sigma_B^X).$$

Da M rechtsstetig ist, können wir das Optional-Stopping-Theorem (siehe z.B. [33, Theorem 2.2.13]) anwenden und erhalten, dass M^Δ ebenfalls ein $\{\mathcal{F}_t^X\}$ -Martingal ist. Sei $0 \leq s \leq t$ und $A \in \mathcal{F}_s^{X^\Delta}$. Aus Lemma 1.8(1) folgt

$$A \cap \{\sigma_B^\Delta > s\} \in \sigma(X^\Delta(u \wedge \sigma_B^\Delta) : 0 \leq u \leq s) = \mathcal{F}_s^X$$

und nach Bemerkung 1.1 gilt

$$\mathbb{E} [M^\Delta(t) - M^\Delta(s)] 1_A = \mathbb{E} [M^\Delta(t) - M^\Delta(s)] 1_{A \cap \{\sigma_B^\Delta > s\}} = 0.$$

M^Δ ist also ein $\{\mathcal{F}_t^{X^\Delta}\}$ -Martingal.

Aus der Beschränktheit des Operators $\tilde{\mathcal{A}}$ folgt, dass

$$M^2(t) - \int_0^t [\tilde{\mathcal{A}}\Psi^2 - 2\Psi \tilde{\mathcal{A}}\Psi] (X(s)) ds$$

ein $\{\mathcal{F}_t^X\}$ -Martingal ist. Nach erneuter Anwendung des Optional-Stopping-Theorems erhalten wir

$$\begin{aligned}\mathbb{E} [M^\Delta(t)]^2 &= \mathbb{E} M^2(t \wedge \sigma_B^X) = \mathbb{E} \int_0^{t \wedge \sigma_B^X} [\tilde{\mathcal{A}}\Psi^2 - 2\Psi \tilde{\mathcal{A}}\Psi](X(s)) ds \\ &= \mathbb{E} \int_0^{t \wedge \sigma_B^\Delta} [\mathcal{A}\Psi^2 - 2\Psi \mathcal{A}\Psi](X^\Delta(s)) ds.\end{aligned}$$

□

1.2.2 Regularität und Martingaleigenschaften

X^Δ bezeichne wieder den minimalen Sprungprozeß bzgl. dem Kern λ und der Anfangsverteilung ν_0 und τ_∞ die durch (1.6) definierte Explosionszeit. Weiterhin sei $\xi_0 \in E$ ein beliebiger, aber fester Punkt und der Prozeß X definiert durch

$$X(\omega, t) = \begin{cases} X^\Delta(\omega, t) & : \tau_\infty(\omega) = \infty \\ \xi_0 & : \tau_\infty(\omega) < \infty \end{cases}, \quad \omega \in \Omega, t \geq 0. \quad (1.14)$$

X ist ein E -wertiger Sprungprozeß mit cadlag-Pfaden und nach Lemma A.6 ist der Prozeß

$$M(\Psi, t) = \Psi(X(t)) - \Psi(X(0)) - \int_0^t \mathcal{A}\Psi(X(s)) ds, \quad t \geq 0, \quad (1.15)$$

$\{\mathcal{F}_t^X\}$ -adaptiert für jedes $\Psi \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$. Hierbei seien der Operator \mathcal{A} und sein Definitionsbereich $\mathcal{D}(\mathcal{A})$ gemäß (1.11) und (1.12) gegeben.

Der minimale Sprungprozeß X^Δ heißt regulär, falls $P(\tau_\infty < \infty) = 0$, d.h., falls X^Δ fast sicher nicht explodiert. In diesem Fall sind X^Δ und X ununterscheidbar und X erbt die Martingaleigenschaften von X^Δ .

Korollar 1.10 *Sei E ein metrischer, separabler und lokal-kompakter Raum, λ ein kompakt-beschränkter Kern auf E und $\nu_0 \in \mathcal{P}(E)$. Sei $\Psi \in C_b(E)$ und $B \in \mathcal{B}(E)$, so dass $\sup_{\xi \in B} \lambda(\xi, E) < \infty$. σ_B^X sei durch (1.8) gegeben. Ist der minimale Sprungprozeß bzgl. λ und ν_0 regulär, so ist $M(\Psi, \cdot \wedge \sigma_B^X)$ ein $\{\mathcal{F}_t^X\}$ -Martingal.*

Beweis. σ_B^Δ und M^Δ seien durch (1.9) und (1.13) gegeben. $M(\Psi, t \wedge \sigma_B^X)$ ist $\{\mathcal{F}_t^X\}$ -meßbar und, da Ψ beschränkt ist und $\sup_{\xi \in B} \mathcal{A}\Psi(\xi) < \infty$, außerdem integrierbar für jedes $t \geq 0$. Da $X = X^\Delta$ f.s. und $\sigma_B^X = \sigma_B^\Delta$ f.s., erhalten wir

$$\begin{aligned}\mathbb{E} \left[\left(M(\Psi, t \wedge \sigma_B^X) - M(\Psi, s \wedge \sigma_B^X) \right) \prod_{i=1}^n 1_{B_i}(X(s_i)) \right] \\ = \mathbb{E} \left[\left(M^\Delta(t) - M^\Delta(s) \right) \prod_{i=1}^n 1_{B_i}(X^\Delta(s_i)) \right]\end{aligned}$$

für beliebige $n \geq 1$, $0 \leq s_1 \leq \dots \leq s_n \leq s \leq t$ und $B_1, \dots, B_n \in \mathcal{B}(E)$. Aus Lemma 1.9 und Lemma 1.2 folgt, dass $M(\Psi, \cdot \wedge \sigma_B^X)$ ein $\{\mathcal{F}_t^X\}$ -Martingal ist. □

Die analytischen Eigenschaften der eindimensionalen Verteilungen des minimalen Sprungprozesses werden in [16] ausführlich untersucht. Insbesondere liefert [16, Theorem 2.25] die Eindeutigkeit der Lösung der Kolmogorov-Gleichungen. Dazu wird im wesentlichen die Existenz einer unbeschränkten Funktion $\eta \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$ vorausgesetzt, die einer gewissen Sublinearitätsbedingung genügt.

Wir adaptieren dieses Kriterium und wenden es direkt auf den minimalen Sprungprozeß an. Der Beweis liefert außerdem wertvolle Abschätzungen für Austrittszeiten von X^Δ aus kompakten Mengen. Seine Idee geht auf den Beweis von [33, Theorem 8.3.1] zurück, dessen Voraussetzungen allerdings in Rahmen dieser Arbeit zu restriktiv sind und insbesondere von den Teilchensystemen für die Koagulation-Fragmentationsgleichung nur teilweise erfüllt werden.

Theorem 1.11 *Sei E ein metrischer, separabler und lokal-kompakter Raum, λ ein kompakt-beschränkter Kern auf E und $\nu_0 \in \mathcal{P}(E)$. Die nichtnegative Funktion $\eta \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$ genüge den Bedingungen*

$$\frac{1}{\eta + 1} \in C_0(E) , \quad (1.16)$$

$$\exists c_0 \geq 0 \quad : \quad \int_E \eta d\nu_0 \leq c_0 \quad (1.17)$$

und

$$\exists c_1 \geq 0 \quad : \quad \mathcal{A}\eta(\xi) \leq c_1 [\eta(\xi) + 1] , \quad \xi \in E . \quad (1.18)$$

Dann ist der minimale Sprungprozeß bzgl. λ und ν_0 regulär. Darüberhinaus gilt für jedes $m \geq 1$

$$\mathbb{E} \eta(X(t \wedge \sigma_{C_m}^X)) < \infty , \quad t \geq 0 , \quad (1.19)$$

und

$$P(\sigma_{C_m}^X \leq t) \leq m^{-1}(c_0 + 1) \exp(c_1 t) , \quad t \geq 0 , \quad (1.20)$$

wobei $C_m = \{\xi \in E : \eta(\xi) \leq m\}$ und $\sigma_{C_m}^X$ durch (1.8) gegeben sei.

Bemerkung 1.12 Falls $\eta \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$ die Bedingung (1.16) erfüllt, so sind

$$C_m = \{\xi \in E : \eta(\xi) \leq m\} \quad \text{und} \quad O_m = \{\xi \in E : \eta(\xi) < m + 1\} , \quad m \geq 1 ,$$

(nach Theorem 1.3) kompakte bzw. offene Mengen, für die (1.2) gilt. Nach Bemerkung 1.6 können wir also Funktion $e_m \in C_c(E)$, $m \geq 1$, mit der Eigenschaft (1.3) wählen.

Beweis. Für $\Psi_k = e_k[\eta + 1] \in C_c(E)$ gilt

$$\begin{aligned} \mathcal{A}\Psi_k(\xi) &= \int_E \left[e_k(\xi_2)[\eta(\xi_2) + 1] - e_k(\xi)[\eta(\xi) + 1] \right] \lambda(\xi, d\xi_2) \\ &\leq \int_E [\eta(\xi_2) - \eta(\xi)] \lambda(\xi, d\xi_2) = \mathcal{A}\eta(\xi) , \quad k \geq m, \xi \in C_m . \end{aligned} \quad (1.21)$$

Sei X^Δ der minimale Sprungprozeß bzgl. λ und ν_0 . Wir definieren die $\{\mathcal{F}_t^{X^\Delta}\}$ -Stoppzeit (siehe (1.9))

$$\sigma_m^\Delta = \inf \{t \geq 0 : X^\Delta(t) \notin C_m\} ,$$

wählen $m \geq 1$ beliebig aber fest und setzen $\sigma = \sigma_m^\Delta$. Nach Lemma 1.8(2) nimmt $X^\Delta(\cdot \wedge \sigma)$ Werte in E an. Wenden wir nacheinander den Satz von der monotonen Konvergenz, Lemma 1.9, (1.17), (1.21) und (1.18) an, so erhalten wir für $t \geq 0$

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \eta(X^\Delta(t \wedge \sigma)) + 1 &= \lim_k \mathbb{E} \Psi_k(X^\Delta(t \wedge \sigma)) \\ &= \lim_k \left[\mathbb{E} \Psi_k(X^\Delta(0)) + \mathbb{E} \int_0^{t \wedge \sigma} \mathcal{A} \Psi_k(X^\Delta(s)) ds \right] \\ &\leq c_0 + 1 + c_1 \mathbb{E} \int_0^{t \wedge \sigma} [\eta(X^\Delta(s)) + 1] ds \\ &\leq c_0 + 1 + c_1 \int_0^t \mathbb{E} [\eta(X^\Delta(s \wedge \sigma)) + 1] ds . \end{aligned}$$

Aus

$$\mathbb{E} \int_0^{t \wedge \sigma} \eta(X^\Delta(s)) ds \leq t m$$

folgt die Beschränktheit von $\mathbb{E} \eta(X^\Delta(\cdot \wedge \sigma))$ auf beschränkten Intervallen und die Gronwall'sche Ungleichung (siehe [33, Anhang Theorem 5.1]) ergibt

$$\mathbb{E} \eta(X^\Delta(t \wedge \sigma)) \leq (c_0 + 1) \exp(c_1 t) . \quad (1.22)$$

Aus $\eta(X^\Delta(\sigma)) > m$ erhalten wir

$$P(\sigma \leq t) = \mathbb{E} 1_{\{\sigma \leq t\}} \leq m^{-1} \mathbb{E} \eta(X^\Delta(t \wedge \sigma)) \leq m^{-1} (c_0 + 1) \exp(c_1 t) . \quad (1.23)$$

Somit konvergiert σ_m^Δ für $m \rightarrow \infty$ f.s. gegen ∞ und X^Δ ist regulär. Dann sind X und X^Δ ununterscheidbar und (1.19) und (1.20) folgen direkt aus (1.22) und (1.23). \square

Ein verwandtes Regularitätskriterium für reellwertige Sprungprozesse findet sich in [52]. Die Frage nach hinreichenden Explosionsbedingungen wollen wir an dieser Stelle nicht diskutieren und verweisen dazu auf [16, Proposition 2.27] und [52], [53].

Abschließend wollen wir die Klasse der in Korollar 1.10 betrachteten beschränkten Funktionen erweitern. Dies geschieht durch Approximation unbeschränkter Funktionen $\Psi \in C(E)$, die von gleicher Größenordnung wie η sind. Vorrangiges Ziel ist dabei die Kontrolle des Prozesses $M(\Psi)$ auf kompakten Intervallen. Die Tatsache, dass $M(\Psi)$ ein lokales Martingal ist, fällt unter Berücksichtigung der Abschätzung (1.20) als Nebenprodukt ab, findet aber in dieser Arbeit nicht weiter Verwendung. Der Vollständigkeit halber sei erwähnt, dass $M(\Psi)$ im Fall $E = \mathbb{Z}$ nach [47] sogar ein Martingal ist.

Theorem 1.13 *Sämtliche Voraussetzungen des Theorems 1.11 seien erfüllt. Sei $m \geq 1$, $C_m = \{\xi \in E : \eta(\xi) \leq m\}$, $\sigma = \sigma_{C_m}^X$ und $\Psi \in C(E)$. Es gebe ein $c > 0$, so dass*

$$|\Psi(\xi)| \leq c \eta(\xi) , \quad \xi \in E . \quad (1.24)$$

Dann liegt Ψ in $\mathcal{D}(\mathcal{A})$, $M(\Psi, \cdot \wedge \sigma)$ ist ein $\{\mathcal{F}_t^X\}$ -Martingal und es gilt

$$\mathbb{E} \sup_{t \leq T} |M(\Psi, t \wedge \sigma)| \leq 2 \left(T \sup_{\xi \in C_m} \int_E [\Psi(\xi_2) - \Psi(\xi)]^2 \lambda(\xi, d\xi_2) \right)^{1/2}, T \geq 0. \quad (1.25)$$

Zum Beweis des Theorems benötigen wir die folgenden zwei Lemmata.

Lemma 1.14 *Sämtliche Voraussetzungen des Theorems 1.11 seien erfüllt. Sei $\sigma = \sigma_{C_m}^X$ und $\Psi \in M(E)$. Falls*

$$\sup_{\xi \in C_m} \int_E |\Psi(\xi_2)| \lambda(\xi, d\xi_2) < \infty, \quad (1.26)$$

so folgt

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbb{E} \int_0^{T \wedge \sigma} \int_{C_k^c} |\Psi(\xi_2)| \lambda(X(s), d\xi_2) ds = 0, \quad T \geq 0.$$

Beweis. Für jedes $\xi_2 \in E$ konvergiert

$$1_{C_k}(\xi_2) |\Psi(\xi_2)| \uparrow |\Psi(\xi_2)|$$

für $k \uparrow \infty$ und nach dem Satz von der monotonen Konvergenz erhalten wir für $\xi \in E$

$$\int_{C_k} |\Psi(\xi_2)| \lambda(\xi, d\xi_2) \uparrow \int_E |\Psi(\xi_2)| \lambda(\xi, d\xi_2).$$

Eine nochmalige Anwendung des Satzes von der monotonen Konvergenz ergibt für jedes $\omega \in \Omega$

$$\int_0^{T \wedge \sigma(\omega)} \int_{C_k} |\Psi(\xi_2)| \lambda(X(\omega, s), d\xi_2) ds \uparrow \int_0^{T \wedge \sigma(\omega)} \int_E |\Psi(\xi_2)| \lambda(X(\omega, s), d\xi_2) ds.$$

Da die rechte Seite nach Voraussetzung (1.26) endliche Erwartung besitzt, folgt die Behauptung schließlich aus

$$\begin{aligned} & \mathbb{E} \int_0^{T \wedge \sigma} \int_{C_k^c} |\Psi(\xi_2)| \lambda(X(s), d\xi_2) ds \\ &= \mathbb{E} \left[\int_0^{T \wedge \sigma} \int_E |\Psi(\xi_2)| \lambda(X(s), d\xi_2) ds \right] - \mathbb{E} \left[\int_0^{T \wedge \sigma} \int_{C_k} |\Psi(\xi_2)| \lambda(X(s), d\xi_2) ds \right]. \end{aligned}$$

□

Lemma 1.15 *Sämtliche Voraussetzungen des Theorems 1.11 seien erfüllt. Sei $\sigma = \sigma_{C_m}^X$ und $\Psi \in C(E)$ erfülle die Bedingung (1.24). Dann gilt $\Psi \in \mathcal{D}(A)$, $M(\Psi, t \wedge \sigma)$ ist integrierbar und \mathcal{F}_t^X -meßbar für jedes $t \geq 0$ und*

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbb{E} \sup_{t \leq T} |M(\Psi, t \wedge \sigma) - M(\Psi_k, t \wedge \sigma)| = 0, \quad T > 0,$$

wobei $\Psi_k = e_k \Psi$ und die Funktionen e_k , $k \geq 1$, gemäß Bemerkung 1.12 gewählt seien.

Beweis. Aus den Bedingungen (1.24) und (1.18) folgt

$$\begin{aligned} \int_E |\Psi(\xi_2)| \lambda(\xi, d\xi_2) &\leq c \int_E [\eta(\xi_2) - \eta(\xi)] \lambda(\xi, d\xi_2) + c \lambda(\xi, E) \eta(\xi) \\ &\leq c c_1 [\eta(\xi) + 1] + c \lambda(\xi, E) \eta(\xi) \end{aligned}$$

und somit $\Psi \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$. Insbesondere erfüllt Ψ die Bedingung (1.26). Da $\eta(X(t \wedge \sigma))$ nach (1.19) für jedes $t \geq 0$ integrierbar ist, trifft dies ebenfalls auf $\Psi(X(t \wedge \sigma))$ und $M(\Psi, t \wedge \sigma)$ zu. Gemäß Lemma A.6 ist $M(\Psi, \cdot \wedge \sigma)$ $\{\mathcal{F}_t^X\}$ -adaptiert. Für $\xi \in C_m$ und $k \geq m$ gilt

$$|\mathcal{A}\Psi(\xi) - \mathcal{A}\Psi_k(\xi)| = \left| \int_E [\Psi(\xi_2) - \Psi_k(\xi_2)] \lambda(\xi, d\xi_2) \right| \leq 2 \int_{C_k^c} |\Psi(\xi_2)| \lambda(\xi, d\xi_2),$$

und es folgt, dass

$$\begin{aligned} &\mathbb{E} \sup_{t \leq T} |M(\Psi, t \wedge \sigma) - M(\Psi_k, t \wedge \sigma)| \\ &\leq 2 \mathbb{E} \sup_{t \leq T} |\Psi(X(t \wedge \sigma)) - \Psi_k(X(t \wedge \sigma))| + 2 \mathbb{E} \int_0^{T \wedge \sigma} \int_{C_k^c} |\Psi(\xi_2)| \lambda(X(s), d\xi_2) ds \\ &\leq 4 \mathbb{E} |\Psi(X(T \wedge \sigma))| 1_{C_k^c}(X(T \wedge \sigma)) + 2 \mathbb{E} \int_0^{T \wedge \sigma} \int_{C_k^c} |\Psi(\xi_2)| \lambda(X(s), d\xi_2) ds. \end{aligned}$$

Da $\Psi(X(T \wedge \sigma))$ integrierbar ist, konvergiert der erste Term für $k \rightarrow \infty$ gegen Null und nach Lemma 1.14 der zweite Term ebenfalls. \square

Beweis des Theorems 1.13. $\Psi \in C(E)$ genüge der Bedingung (1.24). Wir setzen $\Psi_k = e_k \Psi$. Nach Theorem 1.11 ist der minimale Sprungprozeß bzgl. λ und ν_0 regulär und Korollar 1.10 besagt, dass $M(\Psi_k, \cdot \wedge \sigma)$ ein $\{\mathcal{F}_t^X\}$ -Martingal ist. Gemäß Bemerkung 1.1 gilt für jedes $0 \leq s \leq t$ und $A \in \mathcal{F}_s^X$

$$\begin{aligned} &|\mathbb{E}(M(\Psi, t \wedge \sigma) - M(\Psi, s \wedge \sigma)) 1_A| \\ &= |\mathbb{E}(M(\Psi, t \wedge \sigma) - M(\Psi_k, t \wedge \sigma) - M(\Psi, s \wedge \sigma) + M(\Psi_k, s \wedge \sigma)) 1_A|. \end{aligned} \quad (1.27)$$

Nach Lemma 1.15 liegt Ψ in $\mathcal{D}(\mathcal{A})$, ist $M(\Psi, t \wedge \sigma)$ integrierbar und $\{\mathcal{F}_t^X\}$ -meßbar und die rechte Seite von (1.27) konvergiert für $k \rightarrow \infty$ gegen Null. Folglich ist auch $M(\Psi, \cdot \wedge \sigma)$ ein $\{\mathcal{F}_t^X\}$ -Martingal.

Sei $T \geq 0$. Wir nehmen nun an, dass

$$\sup_{\xi \in C_m} q(\xi) < \infty, \quad \text{wobei} \quad q(\xi) = \int_E [\Psi(\xi_2) - \Psi(\xi)]^2 \lambda(\xi, d\xi_2), \quad (1.28)$$

andernfalls ist Ungleichung (1.25) trivialerweise erfüllt. Ψ erfüllt die Bedingung (1.26). Aus

$$\int_E \Psi^2(\xi_2) \lambda(\xi, d\xi_2) \leq \int_E [\Psi(\xi_2) - \Psi(\xi)]^2 \lambda(\xi, d\xi_2) + 2 |\Psi(\xi)| \int_E |\Psi(\xi_2)| \lambda(\xi, d\xi_2)$$

und (1.28) folgt, dass Ψ^2 ebenfalls die Bedingung (1.26) erfüllt. Für $\xi \in C_m$ und $k \geq m$ erhalten wir

$$\begin{aligned} [\mathcal{A}\Psi_k^2 - 2\Psi_k \mathcal{A}\Psi_k](\xi) &\leq q(\xi) + 2 \int_{C_k^c} \Psi^2(\xi_2) \lambda(\xi, d\xi_2) \\ &\quad + 4 |\Psi(\xi)| \int_{C_k^c} |\Psi(\xi_2)| \lambda(\xi, d\xi_2) . \end{aligned} \quad (1.29)$$

X und X^Δ sind ununterscheidbar und aus Lemma 1.9 ergibt sich

$$\mathbb{E} M^2(\Psi_k, T \wedge \sigma) = \mathbb{E} \int_0^{T \wedge \sigma} [\mathcal{A}\Psi_k^2 - 2\Psi_k \mathcal{A}\Psi_k](X(s)) ds . \quad (1.30)$$

Unter Benutzung der Doobschen Ungleichung, (1.30) und (1.29) erhalten wir

$$\begin{aligned} \left(\mathbb{E} \sup_{t \leq T} |M(\Psi_k, t \wedge \sigma)| \right)^2 &\leq 4 \mathbb{E} M^2(\Psi_k, T \wedge \sigma) \\ &\leq 4 \mathbb{E} \int_0^{T \wedge \sigma} q(X(s)) ds + 8 \mathbb{E} \int_0^{T \wedge \sigma} \int_{C_k^c} \Psi^2(\xi_2) \lambda(X(s), d\xi_2) ds \\ &\quad + 16 \sup_{\xi \in C_m} |\Psi(\xi)| \mathbb{E} \int_0^{T \wedge \sigma} \int_{C_k^c} |\Psi(\xi_2)| \lambda(X(s), d\xi_2) ds . \end{aligned}$$

Da Ψ und Ψ^2 die Bedingung (1.26) erfüllen, können wir Lemma 1.14 und außerdem Lemma 1.15 anwenden. Es folgt

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \sup_{t \leq T} |M(\Psi, t \wedge \sigma)| &\leq \mathbb{E} \sup_{t \leq T} |M(\Psi, t \wedge \sigma) - M(\Psi_k, t \wedge \sigma)| + \mathbb{E} \sup_{t \leq T} |M(\Psi_k, t \wedge \sigma)| \\ &\leq \epsilon + 2 \left(T \sup_{\xi \in C_m} \int_E [\Psi(\xi_2) - \Psi(\xi)]^2 \lambda(\xi, d\xi_2) + \epsilon \right)^{1/2} \end{aligned}$$

für jedes $\epsilon > 0$ und genügend großes k . Somit gilt Ungleichung (1.25). \square

1.3 Stochastisches Teilchensystem

Wir stellen nun das stochastische Teilchensystem im Detail vor. Die einzelnen Teilchen können einen Zustand aus einem geeigneten Typenraum \mathcal{Z} annehmen, besitzen ein konstantes Gewicht und werden als Punktmaße auf \mathcal{Z} dargestellt. Damit entspricht der Gesamtzustand des Teilchensystems einem diskreten Maß. Die Wechselwirkung der Teilchen wird durch zustandsabhängige Raten spezifiziert und führt zu einer sprunghaften Zustandsänderung des Teilchensystems.

Wir setzen voraus, dass der Typenraum \mathcal{Z} metrisch, separabel und lokal-kompakt ist. Für ein Maß μ auf $\mathcal{B}(\mathcal{Z})$ und eine integrierbare Funktion $\varphi \in M(\mathcal{Z})$ sei

$$\langle \varphi, \mu \rangle = \int_{\mathcal{Z}} \varphi(x) \mu(dx) .$$

Auf der Menge $\mathcal{M}_b(\mathcal{Z})$ aller beschränkten Maße betrachten wir die grösste Topologie, bezüglich der sämtliche Abbildungen

$$\mu \mapsto \langle \varphi, \mu \rangle, \quad \varphi \in C_b(\mathcal{Z}),$$

stetig sind. Diese Topologie wird schwache Topologie genannt. Der Zustandsraum des Teilchensystems sei gegeben durch

$$E^N = \left\{ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n \delta_{x_i} : n \geq 0, x_i \in \mathcal{Z}, i = 1, \dots, n \right\}, \quad N = 1, 2, \dots, \quad (1.31)$$

versehen mit der induzierten schwachen Topologie.

Bemerkung 1.16 Sei $\mu_k = N^{-1} \sum_{i=1}^{n_k} \delta_{x_i^k}$, $k \geq 1$, und $\mu = N^{-1} \sum_{i=1}^n \delta_{x_i}$. Dann konvergiert μ_k genau dann schwach gegen μ , wenn es ein $l \geq 1$ und Permutationen π_k auf der Menge $\{1, \dots, n\}$ gibt mit der Eigenschaft, dass

$$n_k = n, \quad k \geq l, \quad \text{und} \quad \lim_{k \rightarrow \infty, k \geq l} x_{\pi_k(i)}^k = x_i, \quad i = 1, \dots, n.$$

Lemma 1.17 Sei \mathcal{Z} metrisch, separabel und lokal-kompakt. Dann ist E^N , versehen mit der schwachen Topologie, ebenfalls metrisch, separabel und lokal-kompakt.

Beweis. Da $\mathcal{M}_b(\mathcal{Z})$ metrisch und separabel ist, trifft dies auch auf E^N zu. Zum Beweis der lokalen Kompaktheit von E^N sei $n \geq 0$ und $\mu = N^{-1} \sum_{i=1}^n \delta_{x_i}$. Aus der lokalen Kompaktheit von \mathcal{Z} folgt nach Definition die Existenz offener und kompakter Mengen O bzw. Γ , so dass $\{x_1, \dots, x_n\} \subset O \subset \Gamma$. Die Mengen

$$\left\{ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n \delta_{y_i} : y_i \in O \right\} \quad \text{und} \quad \left\{ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n \delta_{y_i} : y_i \in \Gamma \right\}$$

sind offen bzw. kompakt in E^N bzgl. der schwachen Topologie, was sich leicht mithilfe der Bemerkung 1.16 nachvollziehen läßt. Damit ist gezeigt, dass jedes $\mu \in E^N$ eine kompakte Umgebung besitzt. \square

Damit erfüllt E^N die Voraussetzungen des in Abschnitt 1.2 verwendeten Zustandsraums und das stochastische Teilchensystem läßt sich mithilfe eines Kerns auf E^N spezifizieren, welcher die Quell-, Zerfalls- und Kollisionsereignisse berücksichtigt. Wir nehmen an, dass jedes dieser Ereignisse zu höchstens K neuen Teilchen führt und fassen diese Teilchen analog zur Darstellung des Gesamtzustandes als Element aus dem Raum

$$\Xi = \left\{ \sum_{i=1}^n \delta_{x_i} : 0 \leq n \leq K, x_i \in \mathcal{Z}, i = 1, \dots, n \right\} \quad (1.32)$$

auf. Auf Ξ betrachten wir wieder die schwache Topologie. Die Raten für die Quell-, Zerfalls- und Kollisionsereignisse seien durch λ_0 , λ_1 und λ_2 gegeben und mögen folgender Grundannahme genügen:

$$\begin{aligned} \lambda_0 &\text{ ist ein beschränktes Maß auf } \mathcal{B}(\Xi), \\ \lambda_1 &: \mathcal{Z} \times \mathcal{B}(\Xi) \rightarrow [0, \infty) \text{ ist ein kompakt-beschränkter Kern,} \\ \lambda_2 &: \mathcal{Z} \times \mathcal{Z} \times \mathcal{B}(\Xi) \rightarrow [0, \infty) \text{ ist ein kompakt-beschränkter Kern.} \end{aligned} \quad (1.33)$$

Die Zerfalls- und Kollisionsraten hängen dabei von den Zuständen der involvierten Teilchen ab. Für $\mu \in E^N$, $x, y \in \mathcal{Z}$ und $\xi \in \Xi$ sei

$$\begin{aligned} J_0(\mu, \xi) &= \mu + N^{-1} \xi, \\ J_1(\mu, x, \xi) &= \mu + N^{-1} [\xi - \delta_x] \quad \text{und} \\ J_2(\mu, x, y, \xi) &= \mu + N^{-1} [\xi - \delta_x - \delta_y]. \end{aligned} \quad (1.34)$$

Nach Lemma A.8 gibt es einen kompakt-beschränkten Kern λ^N auf E^N , so dass für jedes $\mu \in E^N$ und $\Psi \in C_b(E^N)$

$$\begin{aligned} &\int_{E^N} [\Psi(\mu_2) - \Psi(\mu)] \lambda^N(\mu, d\mu_2) \\ &= N \int_{\Xi} [\Psi(J_0(\mu, \xi)) - \Psi(\mu)] \lambda_0(d\xi) + \sum_{i=1}^n \int_{\Xi} [\Psi(J_1(\mu, x_i, \xi)) - \Psi(\mu)] \lambda_1(x_i, d\xi) \\ &\quad + \frac{1}{2N} \sum_{1 \leq i \neq j \leq n} \int_{\Xi} [\Psi(J_2(\mu, x_i, x_j, \xi)) - \Psi(\mu)] \lambda_2(x_i, x_j, d\xi). \end{aligned} \quad (1.35)$$

Das stochastische Teilchensystem fassen wir als minimalen Sprungprozeß bzgl. λ^N auf. Sein Verhalten läßt sich folgendermaßen beschreiben: Aus dem Zustand $\mu = N^{-1} \sum_{i=1}^n \delta_{x_i}$ springt der Prozeß in einen der möglichen Folgezustände

$$J_0(\mu, \xi), J_1(\mu, x_i, \xi), J_2(\mu, x_i, x_j, \xi) \in E^N, \quad 1 \leq i \neq j \leq n, \xi \in \Xi.$$

Ist $\xi = \sum_{k=1}^m \delta_{y_k} \in \Xi$, so entspricht $J_0(\mu, \xi)$ der Produktion der Teilchen y_1, \dots, y_m durch eine Quelle und $J_1(\mu, x_i, \xi)$ dem Zerfall des Teilchens x_i in die Teilchen y_1, \dots, y_m . Der Zustand $J_2(\mu, x_i, x_j, \xi)$ modelliert die Entstehung der Teilchen y_1, \dots, y_m infolge der Kollision von x_i und x_j . Die zerfallenden und kollidierenden Teilchen werden dabei dem System entnommen. Die zugehörigen Sprungraten für diese Ereignisse werden durch λ_0 , λ_1 und λ_2 induziert und geeignet normiert.

Die Regularität des Teilchensystems ist nach Bemerkung 1.16 gleichbedeutend damit, dass weder die Gesamtteilchenzahl explodiert noch Teilchen in endlicher Zeit den Typenraum \mathcal{Z} verlassen. Das Verhalten sowohl der Gesamtteilchenzahl als auch der einzelnen Teilchen läßt sich mithilfe einer geeigneten Funktion auf dem Typenraum \mathcal{Z} kontrollieren. Unter Berücksichtigung dieser Funktion läßt sich eine hinreichende Bedingung für die Regularität des Teilchensystems im Sinne des Theorems 1.11 angeben. Dazu sei der zu λ^N gehörige Operator \mathcal{A}^N auf dem Definitionsbereich $\mathcal{D}(\mathcal{A}^N)$ gemäß (1.11) definiert, also

$$\mathcal{A}^N \Psi(\mu) = \int_{E^N} [\Psi(\mu_2) - \Psi(\mu)] \lambda^N(\mu, d\mu_2), \quad \mu \in E^N, \Psi \in \mathcal{D}(\mathcal{A}^N). \quad (1.36)$$

Wir konkretisieren die obige Idee im folgenden Korollar.

Korollar 1.18 (Regularität) *Sei*

$$H \in C(\mathcal{Z}), \text{ so dass } H > 0 \text{ und } \frac{1}{H} \in C_0(\mathcal{Z}), \quad (1.37)$$

und $\nu_0^N \in \mathcal{P}(E^N)$. Es gelte (1.33) und die Funktion $\eta(\mu) = \langle H, \mu \rangle$, $\mu \in E^N$, liege in $\mathcal{D}(\mathcal{A}^N)$. Weiterhin gebe es Konstanten $c_0, c_1 \geq 0$, so dass

$$\int_{E^N} \eta d\nu_0^N \leq c_0 \quad \text{und} \quad \mathcal{A}^N \eta \leq c_1 [\eta + 1] . \quad (1.38)$$

Dann ist der minimale Sprungprozeß bzgl. λ^N und ν_0^N regulär.

Beweis. Nach Lemma 1.17 ist E^N metrisch, separabel und lokal-kompakt und nach Lemma A.8 ist λ^N ein kompakt-beschränkter Kern auf E^N . Aus Bemerkung 1.16 und $H \in C(\mathcal{Z})$ folgt $\eta \in C(E^N)$. Sei $\epsilon > 0$. Da $\frac{1}{H} \in C_0(\mathcal{Z})$, ist $\inf_{x \in \mathcal{Z}} H(x) > 0$ und die Menge $\Gamma = \{x \in \mathcal{Z} : H(x) \leq \epsilon N\}$ nach Theorem 1.3 kompakt. Aus Bemerkung 1.16 folgt die schwache Kompaktheit der Menge

$$\left\{ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n \delta_{x_i} : 0 \leq n \leq \frac{\epsilon N}{\inf_{x \in \mathcal{Z}} H(x)}, x_i \in \Gamma \right\} . \quad (1.39)$$

Die abgeschlossene Menge

$$\{\mu \in E^N : \eta(\mu) \leq \epsilon\} \quad (1.40)$$

ist eine Teilmenge von (1.39), also ebenfalls kompakt, und aus Theorem 1.3 folgt

$$\frac{1}{\eta + 1} \in C_0(E^N) .$$

Somit sind sämtliche Voraussetzungen des Theorems 1.11 erfüllt und wir erhalten die Regularität des minimalen Sprungprozesses bzgl. λ^N und ν_0^N . \square

1.4 Nichtlineare Gleichung und Konvergenz

Zu den einzelnen Raten λ_0 , λ_1 und λ_2 führen wir die Größen

$$\begin{aligned} Q_0(\varphi) &= \int_{\Xi} \langle \varphi, \xi \rangle \lambda_0(d\xi) \\ Q_1(\varphi, \mu) &= \int_{\mathcal{Z}} \int_{\Xi} [\langle \varphi, \xi \rangle - \varphi(x)] \lambda_1(x, d\xi) \mu(dx) \\ Q_2(\varphi, \mu) &= \int_{\mathcal{Z}} \int_{\mathcal{Z}} \int_{\Xi} [\langle \varphi, \xi \rangle - \varphi(x) - \varphi(y)] \lambda_2(x, y, d\xi) \mu(dx) \mu(dy) \end{aligned} \quad (1.41)$$

und deren Summe

$$Q(\varphi, \mu) = Q_0(\varphi) + Q_1(\varphi, \mu) + \frac{1}{2} Q_2(\varphi, \mu) \quad (1.42)$$

ein. Die Entstehung neuer Teilchen gemäß der Quell-, Zerfalls- und Kollisionsereignisse und die Entnahme der involvierten Teilchen läßt sich direkt an den Termen Q_0 , Q_1 und Q_2

ablesen. Der zeitliche Verlauf der Partikelkonzentration läßt sich also durch die nichtlineare Gleichung

$$\langle \varphi, \mu(t) \rangle = \langle \varphi, \mu_0 \rangle + \int_0^t Q(\varphi, \mu(s)) ds, \quad t \geq 0, \varphi \in C_c(\mathcal{Z}), \quad (1.43)$$

beschreiben.

Falls $\varphi \in C_c(\mathcal{Z})$, so ist die Funktion $\Phi(\xi) = \langle \varphi, \xi \rangle$, $\xi \in \Xi$, beschränkt und stetig. Nach Annahme (1.33) gilt $Q_0(\varphi) < \infty$ und aus Lemma A.5 folgt

$$\int_{\Xi} [\langle \varphi, \xi \rangle - \varphi(x)] \lambda_1(x, d\xi) \in M(\mathcal{Z}) \quad (1.44)$$

und

$$\int_{\Xi} [\langle \varphi, \xi \rangle - \varphi(x) - \varphi(y)] \lambda_2(x, y, d\xi) \in M(\mathcal{Z} \times \mathcal{Z}). \quad (1.45)$$

Diese Bemerkungen führen auf den folgenden Lösungsbegriff: Eine maßwertige Abbildung $\mu \in C([0, \infty), \mathcal{M}_b(\mathcal{Z}))$ heißt Lösung der nichtlinearen Gleichung (1.41) - (1.43) zur Anfangsbedingung $\mu_0 \in \mathcal{M}_b(\mathcal{Z})$, falls für jedes $t \geq 0$ und $\varphi \in C_c(\mathcal{Z})$ die Funktionen (1.44) und (1.45) integrierbar bzgl. $\mu(t)$ bzw. $\mu(t) \otimes \mu(t)$ sind, falls $Q(\varphi, \mu(\cdot))$ integrierbar auf $[0, t]$ ist und falls μ die Gleichung (1.43) erfüllt.

Zur Untersuchung der stochastischen Teilchensysteme im Limes $N \rightarrow \infty$ betten wir die verschiedenen Zustandsräume E^N in einen geeigneten maßwertigen Raum ein. Um den Grenzübergang zur nichtlinearen Gleichung vollziehen zu können, ist es notwendig eine Topologie zu wählen, die feiner als die schwache Topologie ist und die Stetigkeit der Abbildung $Q(\varphi, \cdot)$ impliziert. Dazu sei $\mathcal{M}(\mathcal{Z})$ die Menge aller Borel-Maße, d.h. aller Maße μ auf $\mathcal{B}(\mathcal{Z})$, für die

$$\mu(\Gamma) < \infty, \quad \Gamma \subset \mathcal{Z} \text{ kompakt},$$

gilt, und

$$h, H \in C(\mathcal{Z}), \text{ so dass } 0 \leq h \leq cH \text{ für ein } c > 0. \quad (1.46)$$

Auf der Menge

$$\mathcal{M}(H) = \{\mu \in \mathcal{M}(\mathcal{Z}) : \langle H, \mu \rangle < \infty\}$$

bezeichne \mathcal{T}_h die grösste Topologie, bezüglich der sämtliche Abbildungen

$$\mu \mapsto \langle h, \mu \rangle \quad \text{und} \quad \mu \mapsto \langle \varphi, \mu \rangle, \quad \varphi \in C_c(\mathcal{Z}), \quad (1.47)$$

stetig sind. Im weiteren Verlauf machen wir Gebrauch von der Notation $\mathcal{M}(H, h)$ für den topologischen Raum $(\mathcal{M}(H), \mathcal{T}_h)$. Insbesondere bezeichnet dann $\mathcal{M}(0, 0)$ den Raum $\mathcal{M}(\mathcal{Z})$, versehen mit der sogenannten vagen Topologie \mathcal{T}_0 , und $\mathcal{M}(1, 1)$ den Raum $\mathcal{M}_b(\mathcal{Z})$, versehen mit der schwachen Topologie \mathcal{T}_1 ¹.

¹Aus den Lemmata 1.24 und 1.25(2) folgt, dass die Funktion $\Phi(\mu) = \langle \varphi, \mu \rangle$, $\mu \in \mathcal{M}(H)$, stetig ist bzgl. der Topologie \mathcal{T}_h , falls $\varphi \in C(\mathcal{Z})$ und $|\varphi| \leq ch$ für ein $c > 0$. Insofern stimmt die durch (1.47) definierte Topologie \mathcal{T}_1 tatsächlich mit der schwachen Topologie überein.

Wir stellen nun die Hauptresultate dieses Kapitels vor, die die wesentlichen Approximationseigenschaften der stochastischen Teilchensysteme aus Abschnitt 1.3 wiedergeben. Sei λ^N der durch (1.35) definierte kompakt-beschränkte Kern auf E^N und $\nu_0^N \in \mathcal{P}(E^N)$. Wir definieren das Teilchensystem X^N mittels dem minimalen Sprungprozeß bzgl. λ^N und ν_0^N und (1.14). Ist der minimale Sprungprozeß regulär, so sind beide Prozesse ununterscheidbar. In jedem Fall ist X^N ein E^N -wertiger Sprungprozeß mit cadlag-Pfaden.

Nach den Lemmata 1.24 und 1.26 ist der Raum $\mathcal{M}(H, h)$ metrisch und separabel und aus Bemerkung 1.16 folgt direkt die Stetigkeit der Einbettung

$$\iota : (E^N, \mathcal{T}_1) \rightarrow \mathcal{M}(H, h), \quad \iota(\mu) = \mu. \quad (1.48)$$

Somit läßt sich X^N als $D([0, \infty), \mathcal{M}(H, h))$ -wertige Zufallsvariable auffassen. Wir geben zunächst hinreichende Bedingungen an für die relative Kompaktheit der Folge X^N , d.h. für die relative Kompaktheit der Verteilungen von X^N im Raum $\mathcal{P}(D([0, \infty), \mathcal{M}(H, h)))$. Wir nennen den Prozeß X schwachen Limes der Folge X^N , falls es eine Teilfolge gibt, die in Verteilung gegen X konvergiert.

Theorem 1.19 (Relative Kompaktheit) *Sei*

$h, H \in C(\mathcal{Z})$, so dass $h \geq 0$, $H > 0$, $\frac{1}{H} \in C_0(\mathcal{Z})$ und $\frac{h}{H} \in C_0(\mathcal{Z})$,
und $\nu_0^N \in \mathcal{P}(E^N)$. Es gelte

$$\exists c_2 \geq 0 \quad \forall x, y \quad \lambda_0(\Xi) \leq c_2, \quad \lambda_1(x, \Xi) \leq c_2 H(x), \quad \lambda_2(x, y, \Xi) \leq c_2 H(x) H(y) \quad (1.49)$$

und die Bedingung (1.38) sei gleichmäßig in $N \geq 1$ erfüllt. Dann ist die Folge X^N relativ kompakt und für jeden schwachen Limes X gilt

$$P\left(X \in C([0, \infty), \mathcal{M}(H, h))\right) = 1. \quad (1.50)$$

Inbesondere kann in Theorem 1.19 die Funktion $h \equiv 1$ und somit die schwache Topologie auf $\mathcal{M}(H)$ gewählt werden. Unter stärkeren Voraussetzungen löst jeder schwache Limes der Teilchensysteme fast sicher die nichtlineare Gleichung.

Theorem 1.20 (Charakterisierung schwacher Limiten) *Sei*

$h, H \in C(\mathcal{Z})$, so dass $h \geq 0$, $H > 0$, $\frac{1}{H} \in C_0(\mathcal{Z})$ und $\frac{h}{H} \in C_0(\mathcal{Z})$,
und $\nu_0^N \in \mathcal{P}(E^N)$. Es gelte

$$\exists c_2 \geq 0 \quad \forall x, y \quad \lambda_0(\Xi) \leq c_2, \quad \lambda_1(x, \Xi) \leq c_2 h(x), \quad \lambda_2(x, y, \Xi) \leq c_2 h(x) h(y) \quad (1.52)$$

und die Bedingungen (1.38) sei gleichmäßig in $N \geq 1$ erfüllt. Weiterhin gelte

$$\nu_0^N \Rightarrow \mu_0 \in \mathcal{M}(H) \quad (1.53)$$

und

$$\int_{\Xi} \Phi(\xi) \lambda_1(\cdot, d\xi) \in C(\mathcal{Z}), \quad \int_{\Xi} \Phi(\xi) \lambda_2(\cdot, \cdot, d\xi) \in C(\mathcal{Z} \times \mathcal{Z}) \quad (1.54)$$

für $\Phi \equiv 1$ und $\Phi(\cdot) = \langle \varphi, \cdot \rangle$, $\varphi \in C_c(\mathcal{Z})$. Dann ist die Folge X^N relativ kompakt und jeder schwache Limes löst fast sicher die nichtlineare Gleichung (1.41)-(1.43) zur Anfangsbedingung μ_0 .

In Rahmen der Koagulationsgleichung wird sich zeigen, dass die Bedingung (1.52) notwendig zur Charakterisierung der schwachen Limiten ist und nicht durch Bedingung (1.49) ersetzt werden kann. Die Wahl der Topologie \mathcal{T}_h zusammen mit der Stetigkeit der Funktionen (1.54) erlaubt den Grenzübergang der diskreten Teilchensysteme zur nichtlinearen Gleichung für $N \rightarrow \infty$. Bevor wir die Theoreme 1.19 und 1.20 schrittweise in den folgenden drei Abschnitten beweisen, wollen wir noch einige Bemerkungen machen.

Die Eindeutigkeit der Lösung und damit verbundene offene Fragen werden wir einzig und allein im Rahmen der Koagulation-Fragmentationsgleichung diskutieren. Hinsichtlich der nichtlinearen Gleichung läßt sich aber zumindest feststellen, dass aus der Eindeutigkeit unmittelbar die Konvergenz der Teilchensysteme resultiert.

Korollar 1.21 (Konvergenz) *Sämtliche Voraussetzungen des Theorems 1.20 seien erfüllt. Ist die Lösung $\mu \in C([0, \infty), \mathcal{M}(H, h))$ der Gleichung (1.41)-(1.43) zur Anfangsbedingung $\mu_0 \in \mathcal{M}(H)$ eindeutig, so konvergiert die Folge X^N in Verteilung gegen μ .*

Aus der Charakterisierung der schwachen Limiten als fast sichere Lösung der nichtlinearen Gleichung folgt natürlich insbesondere die Existenz einer Lösung. Wir werden diese Tatsache im nächsten Kapitel dazu benutzen, neue Existenzresultate für die Koagulation-Fragmentationsgleichung herzuleiten. Dazu ist in einigen Fällen die Betrachtung eines geeigneten Unterraums von $\mathcal{M}(H, h)$ notwendig. Dies ist Inhalt der nächsten Bemerkung.

Bemerkung 1.22 *Es gelte (1.46). Sei $\varphi \in C(\mathcal{Z})$ nichtnegativ, $\beta \geq 0$ und*

$$\mathcal{M}_\beta(H) = \{\mu \in \mathcal{M}(\mathcal{Z}) : \langle \varphi, \mu \rangle \leq \beta, \langle H, \mu \rangle < \infty\}. \quad (1.55)$$

Wir versehen die Zustandsräume $E_\beta^N = E^N \cap \mathcal{M}_\beta(H)$ wieder mit der schwachen Topologie und nehmen an, dass der durch (1.35) definierte kompakt-beschränkte Kern die Eigenschaft

$$\lambda^N(\mu, E_\beta^N) = \lambda^N(\mu, E^N), \quad \mu \in E_\beta^N, \quad (1.56)$$

besitze. Dann läßt sich das Teilchensystem zur Anfangsverteilung $\nu_0^N \in \mathcal{P}(E_\beta^N)$ auf dem Zustandsraum E_β^N realisieren. Da $\mathcal{M}_\beta(H)$ nach Lemma 1.25(1) eine bzgl. der Topologie \mathcal{T}_h abgeschlossene Teilmenge des Raumes $\mathcal{M}(H, h)$ ist, können wir im Korollar 1.18 und in den Theoremen 1.19 und 1.20 ohne weiteres die Räume E^N und $\mathcal{M}(H, h)$ durch die Räume E_β^N und $(\mathcal{M}_\beta(H), \mathcal{T}_h)$ ersetzen.

Abschließend geben wir noch zwei weitere Bemerkungen zu möglichen Verallgemeinerungen der Teilchensysteme und der nichtlinearen Gleichung.

Bemerkung 1.23

(1) *Das Verhalten des Teilchensystems X^N wurde mittels λ_0 , λ_1 und λ_2 spezifiziert. Tatsächlich ist es denkbar, dass diese Raten von N abhängen. Falls die Voraussetzungen des Theorems 1.19 erfüllt sind und λ_0^N , λ_1^N und λ_2^N der Bedingung (1.49) gleichmäßig in N genügen, so erhalten wir die relative Kompaktheit der Teilchensysteme auch in diesem*

Fall. Um ihre schwachen Limiten als Lösung der Gleichung (1.41)-(1.43) identifizieren zu können, müssen die Voraussetzungen des Theorems 1.20 erfüllt sein und λ_0^N , λ_1^N und λ_2^N der Bedingung (1.52) gleichmäßig in N genügen. Zusätzlich ist es notwendig, dass λ_0^N , λ_1^N und λ_2^N in geeigneter Weise gegen λ_0 , λ_1 und λ_2 konvergieren, was z.B. durch explizite Annahme der in Lemma 1.32 behaupteten Konvergenz (1.84) geschehen kann.

(2) Die nichtlineare Gleichung (1.41)-(1.43) beschreibt u.a. die Wechselwirkung zweier Teilchen und kann auf den Fall von $R > 2$ interagierenden Teilchen verallgemeinert werden. Dazu betrachten wir die Gleichung

$$\langle \varphi, \mu(t) \rangle = \langle \varphi, \mu_0 \rangle + \int_0^t \left[Q_0(\varphi) + \sum_{r=1}^R \frac{1}{r!} Q_r(\varphi, \mu(s)) \right] ds, \quad (1.57)$$

wobei Q_r für $1 \leq r \leq R$ gegeben sei durch

$$Q_r(\varphi, \mu) = \int_{\mathcal{Z}} \cdots \int_{\mathcal{Z}} \int_{\Xi} \left[\langle \varphi, \xi \rangle - \varphi(x_1) - \cdots - \varphi(x_r) \right] \lambda_r(x_1, \dots, x_r, d\xi) \mu(dx_1) \cdots \mu(dx_r).$$

Analog zum Fall $R = 2$ läßt sich zu dieser Gleichung für $N \geq 1$ ein kanonisches Teilchensystem auf dem Zustandsraum E^N konstruieren. Die relative Kompaktheit dieser Teilchensysteme erhält man unter der erweiterten Annahme

$$\lambda_r(x_1, \dots, x_r, \Xi) \leq c_r H(x_1) \cdots H(x_r), \quad 1 \leq r \leq R.$$

Zur Charakterisierung ihrer schwachen Limiten als Lösung der Gleichung (1.57) reicht es aus, die Bedingungen (1.52) und (1.54) in naheliegender Weise auf den Fall $R > 2$ zu übertragen.

1.4.1 Maßwertige Räume

Die Räume $\mathcal{M}(0, 0)$ und $\mathcal{M}(1, 1)$ werden ausführlich in [9] behandelt. Wir leiten hier einige wichtige topologische Eigenschaften der Räume $\mathcal{M}(H, h)$ unter Verwendung der in [9] bewiesenen Resultate her und beginnen mit der Metrisierung der durch (1.47) definierten Topologie \mathcal{T}_h . Nach [9, Lemma 31.4] gibt es eine Folge $\{\psi_k\}_{k=1}^\infty$, deren Elemente dicht in $C_c(\mathcal{Z})$ bzgl. der gleichmäßigen Konvergenz liegen. Weiterhin können wir kompakte Mengen $\Gamma_m \subset \mathcal{Z}$ und Funktionen $e_m \in C_c(\mathcal{Z})$, $m \geq 1$, gemäß Theorem 1.5 und Bemerkung 1.6 wählen. Die neugeordneten Elemente der abzählbaren Menge

$$\{\psi_k : k \geq 1\} \cup \{\psi_k \cdot e_m : k, m \geq 1\} \cup \{e_m : m \geq 1\} \quad (1.58)$$

wollen wir mit $\{\varphi_k\}_{k=1}^\infty$ bezeichnen. Wir setzen $\varphi_0 = h$.

Lemma 1.24 *Es gelte (1.46). Dann erzeugt die Metrik*

$$d_h(\mu, \nu) = \sum_{k=0}^{\infty} 2^{-k} \min\{1, |\langle \varphi_k, \mu \rangle - \langle \varphi_k, \nu \rangle|\}, \quad \mu, \nu \in \mathcal{M}(H), \quad (1.59)$$

die Topologie \mathcal{T}_h auf $\mathcal{M}(H)$.

Beweis. Nach [9, Theorem 31.5] metrisiert d_0 die vage Topologie auf $\mathcal{M}(\mathcal{Z})$. Folglich ist d_h ebenfalls eine Metrik. Sei \mathcal{T} die von d_h erzeugte Topologie. Für jedes $\varphi \in C_c(\mathcal{Z})$ und $\varphi = h$ ist die Funktion $\Phi : (\mathcal{M}(H), \mathcal{T}) \rightarrow \mathbb{R}$, $\Phi(\mu) = \langle \varphi, \mu \rangle$, stetig, d.h., \mathcal{T}_h ist gröber als \mathcal{T} .

Um zu zeigen, dass \mathcal{T} gröber als \mathcal{T}_h ist, genügt es

$$B(\mu, \epsilon) := \{\nu \in \mathcal{M}(H) : d_h(\mu, \nu) < \epsilon\} \in \mathcal{T}_h, \quad \mu \in \mathcal{M}(H), \epsilon > 0,$$

nachzuprüfen. Sei also $\mu \in \mathcal{M}(H)$ und $\epsilon > 0$. Für $\nu \in B(\mu, \epsilon)$ setzen wir $\delta = \epsilon - d_h(\mu, \nu) > 0$ und wählen $l \geq 0$, so dass $\sum_{k=l+1}^{\infty} 2^{-k} < \delta/2$. Da $\Phi_k : (\mathcal{M}(H), \mathcal{T}_h) \rightarrow \mathbb{R}$, $\Phi_k(\sigma) = \langle \varphi_k, \sigma \rangle$, für $k \geq 0$ stetig ist, gilt

$$O(\nu) := \bigcap_{k=0}^l \left\{ \sigma \in \mathcal{M}(H) : |\Phi_k(\nu) - \Phi_k(\sigma)| < \frac{\delta}{2(l+1)} \right\} \in \mathcal{T}_h.$$

Für jedes $\sigma \in O(\nu)$ erhalten wir

$$d_h(\nu, \sigma) \leq \sum_{k=0}^l |\Phi_k(\nu) - \Phi_k(\sigma)| + \sum_{k=l+1}^{\infty} 2^{-k} < \delta$$

und somit

$$d_h(\mu, \sigma) \leq d_h(\mu, \nu) + d_h(\nu, \sigma) < \epsilon,$$

d.h. $O(\nu) \subset B(\mu, \epsilon)$. Folglich gilt

$$B(\mu, \epsilon) = \bigcup_{\nu \in B(\mu, \epsilon)} O(\nu) \in \mathcal{T}_h,$$

was zu zeigen war. \square

Das nächste Lemma stellt Konvergenzeigenschaften vor, die wir im folgenden benötigen.

Lemma 1.25 Sei $h \in C(\mathcal{Z})$ nichtnegativ und $\mu_n \in \mathcal{M}(h)$, $n \geq 1$.

(1) Sei $\mu \in \mathcal{M}(\mathcal{Z})$, so dass $\lim_{n \rightarrow \infty} d_0(\mu_n, \mu) = 0$. Dann gilt

$$\langle h, \mu \rangle \leq \liminf_{n \rightarrow \infty} \langle h, \mu_n \rangle.$$

(2) Sei $\mu \in \mathcal{M}(h)$, so dass $\lim_{n \rightarrow \infty} d_h(\mu_n, \mu) = 0$. Dann gilt für jedes $\varphi \in C(\mathcal{Z})$, welches der Ungleichung $|\varphi| \leq c h$ für ein $c > 0$ genügt,

$$\langle \varphi, \mu_n \rangle \rightarrow \langle \varphi, \mu \rangle. \quad (1.60)$$

Beweis. μ_n konvergiere vag gegen μ . Wir definieren die Maße ν_n und ν durch

$$\nu_n(B) = \int_B h d\mu_n \quad \text{und} \quad \nu(B) = \int_B h d\mu, \quad B \in \mathcal{B}(\mathcal{Z}).$$

Da μ_n und μ Borel-Maße sind und h beschränkt auf kompakten Mengen ist, sind ν_n und ν ebenfalls Borel-Maße auf \mathcal{Z} . Mit $\psi \in C_c(\mathcal{Z})$ liegt auch ψh in $C_c(\mathcal{Z})$ und es folgt

$$\langle \psi, \nu_n \rangle = \langle \psi h, \mu_n \rangle \rightarrow \langle \psi h, \mu \rangle = \langle \psi, \nu \rangle ,$$

d.h., die Folge ν_n konvergiert vag gegen ν .

(1) Aus [9, Lemma 30.3] folgt weiter

$$\langle h, \mu \rangle = \nu(\mathcal{Z}) \leq \liminf_{n \rightarrow \infty} \nu_n(\mathcal{Z}) = \liminf_{n \rightarrow \infty} \langle h, \mu_n \rangle .$$

(2) Es gelte nun $\lim_{n \rightarrow \infty} d_h(\mu_n, \mu) = 0$ und $\varphi \in C(\mathcal{Z})$ genüge der Ungleichung $|\varphi| \leq c h$ für ein $c > 0$. Da ν_n vag gegen ν konvergiert und

$$\nu_n(\mathcal{Z}) = \langle h, \mu_n \rangle \rightarrow \langle h, \mu \rangle = \nu(\mathcal{Z}) ,$$

gibt es zu jedem $\epsilon > 0$ eine kompakte Menge $\Gamma \subset \mathcal{Z}$, für die

$$\nu_n(\Gamma^c) \leq \frac{\epsilon}{3c} , \quad n \geq 1 , \quad \text{und} \quad \nu(\Gamma^c) \leq \frac{\epsilon}{3c} .$$

Wählen wir zu Γ eine Funktion $f \in C_c(\mathcal{Z})$ gemäß Theorem 1.4, so gilt für genügend großes n

$$\begin{aligned} |\langle \varphi, \mu_n \rangle - \langle \varphi, \mu \rangle| &\leq |\langle \varphi(1-f), \mu_n \rangle - \langle \varphi(1-f), \mu \rangle| + |\langle \varphi f, \mu_n \rangle - \langle \varphi f, \mu \rangle| \\ &\leq c \int_{\Gamma^c} h d\mu_n + c \int_{\Gamma^c} h d\mu + |\langle \varphi f, \mu_n \rangle - \langle \varphi f, \mu \rangle| \\ &\leq \epsilon , \end{aligned}$$

womit die Konvergenz (1.60) bewiesen ist. \square

Wir widmen uns nun der Approximation eines beliebigen Maßes $\mu \in \mathcal{M}(H)$ durch eine geeignete Folge von diskreten Maßen. Einerseits ergibt sich hieraus unmittelbar die Separabilität von $\mathcal{M}(H, h)$. Andererseits benötigen wir diese Folge zum Beweis der Existenzresultate für die Koagulation-Fragmentationsgleichung.

Lemma 1.26 *Es gelte (1.46). Sei $\varphi \in C(\mathcal{Z})$ nichtnegativ, $\beta \geq 0$, $\mathcal{M}_\beta(H)$ durch (1.55) gegeben und $E_\beta^N = E^N \cap \mathcal{M}_\beta(H)$. Dann ist $(\mathcal{M}_\beta(H), \mathcal{T}_h)$ separabel und für jedes $\mu_0 \in \mathcal{M}_\beta(H)$ existiert eine Folge $\nu_0^N \in \mathcal{P}(E_\beta^N)$, so dass*

$$\nu_0^N \Rightarrow \mu_0 \quad \text{und} \quad \sup_N \int_{E_\beta^N} \langle H, \mu \rangle \nu_0^N(d\mu) \leq \langle H, \mu_0 \rangle . \quad (1.61)$$

Beweis. Sei \mathcal{Z}_0 eine abzählbar dichte Teilmenge von \mathcal{Z} ,

$$\mathcal{M}_0 = \left\{ \mu = \sum_{i=1}^n r_i \delta_{x_i} : n \geq 0, r_i > 0, x_i \in \mathcal{Z}_0 \right\}$$

und $\mu_0 \in \mathcal{M}_\beta(H)$. Wir konstruieren zunächst eine vag gegen μ_0 konvergente Folge $\tilde{\mu}_k \in \mathcal{M}_0 \cap \mathcal{M}_\beta(H)$, für die

$$\sup_k \langle H, \tilde{\mu}_k \rangle \leq \langle H, \mu_0 \rangle . \quad (1.62)$$

Aus [9, Theorem 30.4] folgt die Existenz einer vag gegen μ_0 konvergenten Folge $\nu_k \in \mathcal{M}_0$. Ohne Einschränkung setzen wir $\langle H, \mu_0 \rangle > 0$ voraus. Die kompakten Mengen $\Gamma_m \subset \mathcal{Z}$ und die Funktionen $e_m \in C_c(\mathcal{Z})$, $m \geq 1$, seien wieder gemäß Theorem 1.5 und Bemerkung 1.6 gewählt. Dann gibt es eine streng steigende Abbildung $\mathcal{K} : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{N}$ mit der Eigenschaft

$$|\langle e_m H, \nu_k \rangle - \langle e_m H, \mu_0 \rangle| \leq m^{-1}, \quad m \geq 1, k \geq \mathcal{K}(m) .$$

Für $\mathcal{K}(m) \leq k < \mathcal{K}(m+1)$ definieren wir

$$\epsilon_k = \min \left\{ 1, \frac{\langle e_m H, \mu_0 \rangle}{\langle e_m H, \nu_k \rangle} \right\} \quad \text{und} \quad \tilde{\mu}_k(B) = \epsilon_k \nu_k(B \cap \Gamma_m), \quad B \in \mathcal{B}(\mathcal{Z}) .$$

Da $\epsilon_k \rightarrow 1$ für $k \rightarrow \infty$, konvergiert $\tilde{\mu}_k$ ebenfalls vag gegen μ_0 . Weiterhin gilt $\tilde{\mu}_k \in \mathcal{M}_0$ und

$$\langle H, \tilde{\mu}_k \rangle = \langle e_m H, \tilde{\mu}_k \rangle \leq \epsilon_k \langle e_m H, \nu_k \rangle \leq \langle e_m H, \mu_0 \rangle \leq \langle H, \mu_0 \rangle ,$$

womit die Folge $\tilde{\mu}_k$ (1.62) erfüllt. Da $\epsilon_k \leq 1$, können wir die gesamte Prozedur für die Funktion φ anstelle von H wiederholen und erhalten eine Folge aus $\mathcal{M}_0 \cap \mathcal{M}_\beta(H)$ mit den gleichen Eigenschaften. Diese wollen wir weiterhin mit $\tilde{\mu}_k$ bezeichnen.

Wir setzen

$$\mu^N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n [r_i N] \delta_{x_i}, \quad \mu \in \mathcal{M}_0, N \in \mathbb{N},$$

und wählen eine streng steigende Abbildung $\mathcal{N} : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{N}$ mit der Eigenschaft

$$\tilde{\mu}_k(\mathcal{Z}) - \tilde{\mu}_k^N(\mathcal{Z}) \leq k^{-1}, \quad k \geq 1, N \geq \mathcal{N}(k) . \quad (1.63)$$

Für $\mathcal{N}(k) \leq N < \mathcal{N}(k+1)$ setzen wir $\mu_N = \tilde{\mu}_k^N \in E_\beta^N \cap \mathcal{M}_0$. Aus (1.63) erhalten wir für jedes $\varphi \in C_c(\mathcal{Z})$

$$\begin{aligned} |\langle \varphi, \mu_N \rangle - \langle \varphi, \mu_0 \rangle| &\leq |\langle \varphi, \tilde{\mu}_k^N \rangle - \langle \varphi, \tilde{\mu}_k \rangle| + |\langle \varphi, \tilde{\mu}_k \rangle - \langle \varphi, \mu_0 \rangle| \\ &\leq \|\varphi\| k^{-1} + |\langle \varphi, \tilde{\mu}_k \rangle - \langle \varphi, \mu_0 \rangle| , \end{aligned}$$

so dass die vage Konvergenz von $\tilde{\mu}_k$ die vage Konvergenz von μ_N gegen μ_0 nach sich zieht. Aus (1.62) und Lemma 1.25(1) folgt $\langle H, \mu_N \rangle \rightarrow \langle H, \mu_0 \rangle$ und aus Lemma 1.25(2) die Konvergenz $d_h(\mu_N, \mu_0) \rightarrow 0$. Insbesondere liegt also die abzählbare Menge $\bigcup_N E_\beta^N \cap \mathcal{M}_0$ dicht in $(\mathcal{M}_\beta(H), \mathcal{T}_h)$. Die Folge $\nu_0^N = \delta_{\mu_N} \in \mathcal{P}(E_\beta^N)$ besitzt die Eigenschaft (1.61). \square

Aus dem Beweis von [9, Theorem 31.5] ergibt sich die Vollständigkeit des metrischen Raumes $(\mathcal{M}(\mathcal{Z}), d_0)$. Dies trifft im allgemeinen nicht auf $(\mathcal{M}(H), d_h)$ zu, wie das folgende

Beispiel zeigt: Falls \mathcal{Z} nicht kompakt ist, gibt es eine Folge $x_n \in \mathcal{Z}$, die gegen den kompaktifizierenden Punkt Δ konvergiert. Die Dirac-Maße δ_{x_n} konvergieren vag gegen das Nullmaß und bilden eine Cauchyfolge bzgl. der Metrik d_1 . Da sie allerdings nicht schwach gegen das Nullmaß konvergieren, kann $(\mathcal{M}_b(\mathcal{Z}), d_1)$ nicht vollständig sein.

Man beachte, dass jeder kompakte, metrische Raum vollständig ist. Unter zusätzlichen Voraussetzungen an die Funktionen H und h läßt sich die Kompaktheit der Mengen $\{\mu \in \mathcal{M}(\mathcal{Z}) : \langle H, \mu \rangle \leq n\}$, $n \in \mathbb{N}$, zeigen. Diese Mengen sind aufsteigend, überdecken $\mathcal{M}(H)$ und erlauben die Anwendung von Lokalisierungstechniken auf die Teilchensysteme.

Lemma 1.27 *Sei $h, H \in C(\mathcal{Z})$, so dass $h \geq 0$, $\inf_{x \in \mathcal{Z}} H(x) > 0$ und $\frac{h}{H} \in C_0(\mathcal{Z})$. Dann ist für jedes $\epsilon > 0$ die Menge*

$$C_\epsilon = \{\mu \in \mathcal{M}(\mathcal{Z}) : \langle H, \mu \rangle \leq \epsilon\}$$

kompakt bzgl. \mathcal{T}_h .

Beweis. Wir betrachten die Menge

$$\tilde{C} = \{\nu \in \mathcal{M}(\mathcal{Z}) : \nu(\mathcal{Z}) \leq \epsilon\}$$

und die Abbildung

$$F : (\tilde{C}, d_0) \rightarrow (C_\epsilon, d_h), \quad F(\nu)(B) = \int_B \frac{1}{H} d\nu, \quad B \in \mathcal{B}(\mathcal{Z}).$$

$\nu_k \in \tilde{C}$ konvergiere vag gegen $\nu \in \tilde{C}$. Eine Anwendung von [9, Theorem 30.6] ergibt

$$\langle \varphi, F(\nu_k) \rangle = \langle \frac{\varphi}{H}, \nu_k \rangle \rightarrow \langle \frac{\varphi}{H}, \nu \rangle = \langle \varphi, F(\nu) \rangle, \quad \frac{\varphi}{H} \in C_0(\mathcal{Z}),$$

woraus die Stetigkeit von F folgt. Nach [9, Korollar 31.3] ist \tilde{C} vag kompakt und somit $C_\epsilon = F(\tilde{C})$ kompakt bzgl. der Topologie \mathcal{T}_h . \square

1.4.2 Relative Kompaktheit

Zum Beweis der relativen Kompaktheit adaptieren wir für unsere Zwecke ein Kriterium aus [33] für cadlag-Prozesse in einem metrischen Zustandsraum. Dieses Kriterium findet außerdem in Abschnitt 2.3 Verwendung.

Theorem 1.28 *Seien $h, H \in C(\mathcal{Z})$, so dass $0 \leq h \leq cH$ für ein $c > 0$. Sei E ein Unterraum von $\mathcal{M}(H, h)$ und seien X^N , $N \geq 1$, E -wertige cadlag-Prozesse. Falls*

$$\forall T, \epsilon > 0 \quad \exists C \subset E \text{ kompakt} \quad : \quad \inf_N P(X^N(t) \in C, 0 \leq t \leq T) \geq 1 - \epsilon \quad (1.64)$$

und falls für jedes $\varphi \in C_c(\mathcal{Z}) \cup \{h\}$, $T > 0$ und $\epsilon > 0$ ein $\Delta t > 0$ und ein $N_0 \in \mathbb{N}$ existieren, so dass

$$\sup_{N \geq N_0} P \left(\sup_{|s-t| \leq \Delta t, t \leq T} |\langle \varphi, X^N(s) \rangle - \langle \varphi, X^N(t) \rangle| \geq \epsilon \right) \leq \epsilon, \quad (1.65)$$

dann ist die Folge X^N relativ kompakt und für jeden schwachen Limes X gilt

$$P(X \in C([0, \infty), E)) = 1. \quad (1.66)$$

Beweis. Wir wenden [33, Theorem 3.7.6] auf die Folge X^N an. Gemäß Lemma 1.26 ist (E, d_h) metrisch und separabel und X^N läßt sich als $D([0, \infty), E)$ -wertige Zufallsvariable ansehen. Aus diesem Grund besteht keine Notwendigkeit zur Modifikation des Prozesses X^N . Die erste Bedingung aus [33, Theorem 3.7.6] stimmt mit (1.64) überein. Zum Beweis der relativen Kompaktheit bleibt also die zweite Bedingung

$$\forall T, \epsilon > 0 \quad \exists \delta > 0 \quad : \quad \sup_N P(w(X^N, \delta, T) \geq \epsilon) \leq \epsilon \quad (1.67)$$

nachzuprüfen. Hierbei sei das Stetigkeitsmodul $w(\mu, \delta, T)$ für $\mu \in D([0, \infty), E)$ und $\delta, T > 0$ gegeben durch

$$w(\mu, \delta, T) = \inf_{\{t_i\}} \max_i \sup_{s, t \in [t_{i-1}, t_i)} d_h(\mu(s), \mu(t))$$

und das Infimum erstreckt sich über alle Partitionen der Form $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_{n-1} < T \leq t_n$, für die $\min_{1 \leq i \leq n} (t_i - t_{i-1}) > \delta$ und $n \geq 1$.

Sei $T, \epsilon > 0$ beliebig und $L \geq 0$, so dass $\sum_{k=L+1}^{\infty} 2^{-k} \leq \frac{\epsilon}{2}$. Aus der Definition (1.59) der Metrik d_h erhalten wir

$$\begin{aligned} & P \left(\sup_{|s-t| \leq \Delta t, t \leq T} d_h(X^N(s), X^N(t)) \geq \epsilon \right) \\ & \leq P \left(\sup_{|s-t| \leq \Delta t, t \leq T} \sum_{k=0}^L |\langle \varphi_k, X^N(s) \rangle - \langle \varphi_k, X^N(t) \rangle| \geq \frac{\epsilon}{2} \right) \\ & \leq \sum_{k=0}^L P \left(\sup_{|s-t| \leq \Delta t, t \leq T} |\langle \varphi_k, X^N(s) \rangle - \langle \varphi_k, X^N(t) \rangle| \geq \frac{\epsilon}{2(L+1)} \right). \end{aligned}$$

Nach (1.65) gibt es $\Delta t, N_0 > 0$ mit der Eigenschaft

$$\sup_{N \geq N_0} P \left(\sup_{|s-t| \leq \Delta t, t \leq T} d_h(X^N(s), X^N(t)) \geq \epsilon \right) \leq \epsilon. \quad (1.68)$$

Für jedes $\delta < \Delta t$ gilt die Ungleichung

$$w(\mu, \delta, T) \leq \sup_{|s-t| \leq \Delta t, s \leq T} d_h(\mu(s), \mu(t)). \quad (1.69)$$

Gemäß [33, Lemma 3.6.2(a)] können wir $\delta_N > 0$ so wählen, dass $P(w(X^N, \delta_N, T) \geq \epsilon) \leq \epsilon$. Mit der Wahl $0 < \delta < \min\{\Delta t, \delta_1, \dots, \delta_{N_0-1}\}$ folgt aus (1.68) und (1.69) Bedingung (1.67), womit die relative Kompaktheit der Folge X^N bewiesen ist. Nach (1.68) konvergiert $\sup_{t \leq T} d_h(X^N(t), X^N(t-))$ in Verteilung gegen Null für $N \rightarrow \infty$ und eine Anwendung von [33, Theorem 3.10.2(a)] ergibt (1.66). \square

Die Bedingungen der Theoreme 1.19 und 1.20 implizieren die des Korollars 1.18. Unter den Voraussetzungen des Korollars ist die Funktion $\eta(\mu) = \langle H, \mu \rangle$, $\mu \in E^N$, stetig bzgl. der schwachen Topologie und die Mengen

$$C_m^N = \{ \mu \in E^N : \eta(\mu) \leq m \}, \quad m \geq 1, N \geq 1, \quad (1.70)$$

schwach kompakt (siehe (1.40)). Sei X^N wieder das Teilchensystem aus Theorem 1.19. Gemäß (1.8) sind durch

$$\sigma_m^N = \inf \{ t \geq 0 : X^N(t) \notin C_m^N \} \quad (1.71)$$

$\{\mathcal{F}_t^{X^N}\}$ -Stoppzeiten gegeben. Für $\varphi \in C_c(\mathcal{Z})$ ist

$$\Phi(\mu) = \langle \varphi, \mu \rangle, \quad \mu \in E^N, \quad (1.72)$$

stetig und aus $H \in C(\mathcal{Z})$ und $H > 0$ folgt $|\Phi| \leq c\eta$ für ein $c > 0$. Nach Theorem 1.13 liegt mit η auch die Funktion Φ im Definitionsbereich des durch (1.36) gegebenen Operators \mathcal{A}^N . Wir definieren

$$M_\varphi^N(t) = \Phi(X^N(t)) - \Phi(X^N(0)) - \int_0^t \mathcal{A}^N \Phi(X^N(s)) ds \quad (1.73)$$

in Anlehnung an (1.15) und werden zum Beweis der relativen Kompaktheit und der Charakterisierung der schwachen Limiten häufig Gebrauch von der Notation (1.70)-(1.73) machen. Um die Bedingungen des Theorems 1.28 nachzuprüfen, benötigen wir die folgenden beiden Lemmata.

Lemma 1.29 *H genüge den Bedingungen (1.37) und (1.49). Dann folgt für $\varphi \in C_c(\mathcal{Z})$ und $m \geq 1$*

$$\sup_N \sup_{\mu \in C_m^N} \left| \int_{E^N} [\Phi(\nu) - \Phi(\mu)] \lambda^N(\mu, d\nu) \right| < \infty$$

und

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sup_{\mu \in C_m^N} \int_{E^N} [\Phi(\nu) - \Phi(\mu)]^2 \lambda^N(\mu, d\nu) = 0.$$

Beweis. Wir wählen $c_2 > 0$ gemäß (1.49). Nach (1.35) folgt für jedes $\mu = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n \delta_{x_i} \in E^N$

$$\begin{aligned} & \left| \int_{E^N} [\Phi(\nu) - \Phi(\mu)] \lambda^N(\mu, d\nu) \right| \\ &= \left| \int_{\Xi} \langle \varphi, \xi \rangle \lambda_0(d\xi) + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n \int_{\Xi} [\langle \varphi, \xi \rangle - \varphi(x_i)] \lambda_1(x_i, d\xi) \right. \\ & \quad \left. + \frac{1}{2N^2} \sum_{1 \leq i \neq j \leq n} \int_{\Xi} [\langle \varphi, \xi \rangle - \varphi(x_i) - \varphi(x_j)] \lambda_2(x_i, x_j, d\xi) \right| \\ &\leq c_2 \|\varphi\| (K+2) \left[\lambda_0(\Xi) + \int_{\mathcal{Z}} \lambda_1(x, \Xi) \mu(dx) + \int_{\mathcal{Z}} \int_{\mathcal{Z}} \lambda_2(x, y, \Xi) \mu(dx) \mu(dy) \right] \\ &\leq c_2 \|\varphi\| (K+2) [1 + \langle H, \mu \rangle + \langle H, \mu \rangle^2] \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
& \int_{E^N} [\Phi(\nu) - \Phi(\mu)]^2 \lambda^N(\mu, d\nu) \\
&= \frac{1}{N} \int_{\Xi} \langle \varphi, \xi \rangle^2 \lambda_0(d\xi) + \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^n \int_{\Xi} [\langle \varphi, \xi \rangle - \varphi(x_i)]^2 \lambda_1(x_i, d\xi) \\
&\quad + \frac{1}{2N^3} \sum_{1 \leq i \neq j \leq n} \int_{\Xi} [\langle \varphi, \xi \rangle - \varphi(x_i) - \varphi(x_j)]^2 \lambda_2(x_i, x_j, d\xi) \\
&\leq \frac{c_2 \|\varphi\|^2 (K+2)^2}{N} [1 + \langle H, \mu \rangle + \langle H, \mu \rangle^2] .
\end{aligned}$$

□

Lemma 1.30 *H genüge den Bedingungen (1.37) und (1.49) und die Bedingung (1.38) sei gleichmäßig in $N \geq 1$ erfüllt. Dann folgt*

$$P(\sigma_m^N > T) \geq 1 - m^{-1}(c_0 + 1) \exp(c_1 T), \quad T \geq 0, m \geq 1, N \geq 1, \quad (1.74)$$

und

$$\lim_N \mathbb{E} \sup_{t \leq T} |M_\varphi^N(t \wedge \sigma_m^N)| = 0, \quad T \geq 0, m \geq 1, \varphi \in C_c(\mathcal{Z}). \quad (1.75)$$

Beweis. (1.74) folgt direkt aus Ungleichung (1.20) des Theorems 1.11 und (1.75) aus Lemma 1.29 und Ungleichung (1.25) des Theorems 1.13. □

Beweis des Theorems 1.19. Wir setzen $E = \mathcal{M}(H)$ und wenden Theorem 1.28 an. Seien T und $\epsilon > 0$ und sei m gemäß Lemma 1.30 derart gewählt, dass

$$\inf_N P(\sigma_m^N > T + 1) \geq 1 - \frac{\epsilon}{2}. \quad (1.76)$$

Nach Lemma 1.27 ist

$$C = \{\mu \in \mathcal{M}(H) : \langle H, \mu \rangle \leq m\}$$

kompakt und es gilt

$$\inf_N P(X^N(t) \in C, 0 \leq t \leq T) \geq \inf_N P(\sigma_m^N > T + 1) \geq 1 - \epsilon,$$

d.h., Bedingung (1.64) ist erfüllt. Wir zeigen nun, dass Bedingung (1.65) ebenfalls erfüllt ist. Dazu betrachten wir zunächst den Fall $\varphi = h$. Da nach Voraussetzung $\frac{\varphi}{H} \in C_0(\mathcal{Z})$ gilt, erhalten wir aus Theorem 1.3 die Kompaktheit der Menge

$$\Gamma = \left\{ x \in \mathcal{Z} : \frac{|\varphi(x)|}{H(x)} \geq \frac{\epsilon}{8m} \right\}. \quad (1.77)$$

Unter Verwendung des Theorems 1.4 können wir ein $\tilde{\varphi} \in C_c(\mathcal{Z})$ wählen mit der Eigenschaft

$$\tilde{\varphi}(x) = \varphi(x), \quad x \in \Gamma, \quad \text{und} \quad |\tilde{\varphi}(x)| \leq |\varphi(x)|, \quad x \in \mathcal{Z}. \quad (1.78)$$

Für $0 \leq s \leq t < \sigma_m^N$ gilt pfadweise $\langle H, X^N(s) \rangle \leq m$ und nach (1.78) und (1.77)

$$\begin{aligned}
& |\langle \varphi, X^N(s) \rangle - \langle \varphi, X^N(t) \rangle| \\
& \leq |\langle \varphi - \tilde{\varphi}, X^N(s) \rangle| + |\langle \varphi - \tilde{\varphi}, X^N(t) \rangle| + |\langle \tilde{\varphi}, X^N(s) \rangle - \langle \tilde{\varphi}, X^N(t) \rangle| \\
& \leq \int_{\Gamma^c} \frac{2|\varphi|}{H} H dX^N(s) + \int_{\Gamma^c} \frac{2|\varphi|}{H} H dX^N(t) + |\langle \tilde{\varphi}, X^N(s) \rangle - \langle \tilde{\varphi}, X^N(t) \rangle| \\
& \leq \frac{\epsilon}{2} + |\langle \tilde{\varphi}, X^N(s) \rangle - \langle \tilde{\varphi}, X^N(t) \rangle|.
\end{aligned}$$

Sei nun $\varphi = h$ und $\tilde{\varphi} \in C_c(\mathcal{Z})$ wie in (1.78) gegeben oder $\tilde{\varphi} = \varphi \in C_c(\mathcal{Z})$. Außerdem sei $\Phi \in C(E^N)$ durch $\Phi(\mu) = \langle \tilde{\varphi}, \mu \rangle$ und $M_{\tilde{\varphi}}^N$ durch (1.73) definiert. In beiden Fällen folgt pfadweise für $0 \leq s \leq t < \sigma_m^N$

$$\begin{aligned}
|\langle \varphi, X^N(s) \rangle - \langle \varphi, X^N(t) \rangle| & \leq \frac{\epsilon}{2} + |M_{\tilde{\varphi}}^N(s) - M_{\tilde{\varphi}}^N(t)| + \int_s^t |\mathcal{A}^N \Phi(X^N(r))| dr \\
& \leq \frac{\epsilon}{2} + |M_{\tilde{\varphi}}^N(s) - M_{\tilde{\varphi}}^N(t)| + c(t - s), \tag{1.79}
\end{aligned}$$

wobei $c = \sup_N \sup_{\mu \in C_m^N} |\mathcal{A}^N \Phi(\mu)|$ nach Lemma 1.29 endlich ist. Sei $0 < \Delta t < \frac{\epsilon}{4c} \wedge 1$. Unter Verwendung von (1.76), (1.79) und der Tschebyscheff-Ungleichung folgt weiter

$$\begin{aligned}
& P \left(\sup_{|s-t| \leq \Delta t, t \leq T} |\langle \varphi, X^N(s) \rangle - \langle \varphi, X^N(t) \rangle| \geq \epsilon \right) \\
& \leq P \left(\sup_{|s-t| \leq \Delta t, t \leq T} |M_{\tilde{\varphi}}^N(s) - M_{\tilde{\varphi}}^N(t)| \geq \frac{\epsilon}{4}, \sigma_m^N > T + 1 \right) + \frac{\epsilon}{2} \\
& \leq P \left(\sup_{t \leq T+1} |M_{\tilde{\varphi}}^N(t)| \geq \frac{\epsilon}{8}, \sigma_m^N > T + 1 \right) + \frac{\epsilon}{2} \\
& \leq \frac{8}{\epsilon} \mathbb{E} \sup_{t \leq T+1} |M_{\tilde{\varphi}}^N(t \wedge \sigma_m^N)| + \frac{\epsilon}{2}.
\end{aligned}$$

Nach Lemma 1.30 ist der Erwartungswert für genügend große N kleiner als $\epsilon^2/16$ und Bedingung (1.65) somit erfüllt. Aus Theorem 1.28 ergibt sich schließlich die relative Kompaktheit der Folge X^N und die f.s. Stetigkeit (1.50) der schwachen Limiten. \square

1.4.3 Charakterisierung schwacher Limiten

Sei $Q(\varphi, \mu)$ durch (1.42) und Q^N durch

$$Q^N(\varphi, \mu) = \mathcal{A}^N \Phi(\mu), \quad \varphi \in C_c(\mathcal{Z}), \mu \in E^N,$$

gegeben, wobei wieder $\Phi(\mu) = \langle \varphi, \mu \rangle$ sei. Um zu zeigen, dass jeder schwache Limes der Folge X^N fast sicher die Gleichung (1.41)-(1.43) löst, benötigen wir einige Stetigkeits- und Konvergenzeigenschaften von Q und Q^N .

Lemma 1.31 Die Bedingungen (1.51), (1.52) und (1.54) seien erfüllt.

(1) Dann ist für jedes $\varphi \in C_c(\mathcal{Z})$ die Abbildung

$$M_\varphi : D([0, \infty), \mathcal{M}(H, h)) \rightarrow D([0, \infty), \mathbb{R}) , \quad (1.80)$$

gegeben durch

$$M_\varphi(\mu, t) = \langle \varphi, \mu(t) \rangle - \langle \varphi, \mu(0) \rangle - \int_0^t Q(\varphi, \mu(s)) ds , \quad (1.81)$$

stetig bzgl. der Skorohod-Topologie.

(2) Sei $\{\varphi_k\}_{k=1}^\infty$ durch (1.58) gegeben und $\mu \in D([0, \infty), \mathcal{M}(H, h))$, so dass $M_{\varphi_k}(\mu) \equiv 0$, $k \geq 1$. Dann gilt $M_\varphi(\mu) \equiv 0$ für jedes $\varphi \in C_c(\mathcal{Z})$.

Beweis. (1) Sei $\varphi \in C_c(\mathcal{Z})$ und $\mu \in \mathcal{M}(H)$. Wir setzen

$$q_1(\varphi, x) = \int_{\Xi} [\langle \varphi, \xi \rangle - \varphi(x)] \lambda_1(x, d\xi) , \quad x \in \mathcal{Z},$$

und

$$q_2(\varphi, x, y) = \int_{\Xi} [\langle \varphi, \xi \rangle - \varphi(x) - \varphi(y)] \lambda_2(x, y, d\xi) , \quad x, y \in \mathcal{Z}, \quad (1.82)$$

und erhalten für Q_1 und Q_2 aus (1.41) die Darstellung

$$Q_1(\varphi, \mu) = \int_{\mathcal{Z}} q_1(\varphi, x) \mu(dx) , \quad Q_2(\varphi, \mu) = \int_{\mathcal{Z}} \int_{\mathcal{Z}} q_2(\varphi, x, y) \mu(dx) \mu(dy) .$$

Aus Bedingung (1.52) folgt

$$|q_1(\varphi, x)| \leq c_2(K+1) \|\varphi\| h(x) , \quad |q_2(\varphi, x, y)| \leq c_2(K+2) \|\varphi\| h(x) h(y) \quad (1.83)$$

und aus Bedingung (1.54) $q_1(\varphi) \in C(\mathcal{Z})$ and $q_2(\varphi) \in C(\mathcal{Z} \times \mathcal{Z})$. Sei $\mu_n, \mu \in \mathcal{M}(H)$, so dass $d_h(\mu_n, \mu) \rightarrow 0$ für $n \rightarrow \infty$. Aus Lemma 1.25(2) ergibt sich

$$Q(\varphi, \mu_n) \rightarrow Q(\varphi, \mu) ,$$

d.h., $Q(\varphi, \cdot)$ ist stetig. Die Stetigkeit der Abbildung M_φ folgt damit direkt aus Lemma A.3.

(2) Zu $\varphi \in C_c(\mathcal{Z})$ gibt es eine Teilfolge φ_{k_n} derart, dass $\|\varphi_{k_n} - \varphi\| \rightarrow 0$ für $n \rightarrow \infty$. Der Übersichtlichkeit wegen lassen wir den Index n im folgenden weg. Es gilt $\sup_k \|\varphi_k\| < \infty$ und $\langle \varphi_k, \xi \rangle \rightarrow \langle \varphi, \xi \rangle$, $\xi \in \Xi$. Aus dem Satz von der dominierten Konvergenz erhalten wir für jedes $x, y \in \mathcal{Z}$

$$q_1(\varphi_k, x) \rightarrow q_1(\varphi, x) \quad \text{und} \quad q_2(\varphi_k, x, y) \rightarrow q_2(\varphi, x, y)$$

und für $\mu \in \mathcal{M}(H)$

$$Q(\varphi_k, \mu) \rightarrow Q(\varphi, \mu) .$$

Sei nun $t \geq 0$ und $\mu \in D([0, \infty), \mathcal{M}(H, h))$, so dass $M_{\varphi_k}(\mu) \equiv 0$, $k \geq 1$. Aus (1.83) folgt

$$\sup_k \sup_{s \leq t} |Q(\varphi_k, \mu(s))| \leq c_2(K+2) \sup_k \|\varphi_k\| \sup_{s \leq t} [1 + \langle h, \mu(s) \rangle + \langle h, \mu(s) \rangle^2] < \infty$$

und eine nochmalige Anwendung des Satzes von der dominierten Konvergenz ergibt

$$\begin{aligned} \langle \varphi, \mu(t) \rangle &= \lim_k \langle \varphi_k, \mu(t) \rangle = \lim_k \langle \varphi_k, \mu(0) \rangle + \int_0^t Q(\varphi_k, \mu(s)) ds \\ &= \langle \varphi, \mu(0) \rangle + \int_0^t Q(\varphi, \mu(s)) ds . \end{aligned}$$

□

Lemma 1.32 *Die Bedingungen (1.51) und (1.52) seien erfüllt. Dann gilt*

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sup_{\mu \in C_m^N} |Q(\varphi, \mu) - Q^N(\varphi, \mu)| = 0, \quad m \geq 1, \varphi \in C_c(\mathcal{Z}), \quad (1.84)$$

wobei C_m^N durch (1.70) gegeben sei.

Beweis. Sei $\epsilon > 0$. Nach (1.51) und Theorem 1.3 ist

$$\Gamma(\epsilon) = \left\{ x \in \mathcal{Z} : \frac{h(x)}{H(x)} \geq \epsilon \right\}$$

kompakt. Jedes $\mu = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n \delta_{x_i} \in C_m^N$ erfüllt die Ungleichung

$$\max_{1 \leq i \leq n} H(x_i) \leq m N .$$

Aus (1.52) folgt (1.83) mit der Bezeichnung (1.82) und weiter

$$\begin{aligned} \left| \int_{\mathcal{Z}} q_2(\varphi, x, x) \mu(dx) \right| &\leq c_2(K+2) \|\varphi\| \left[\int_{\Gamma(\epsilon)} h^2(x) \mu(dx) + \int_{\Gamma(\epsilon)^c} h^2(x) \mu(dx) \right] \\ &\leq c_2(K+2) \|\varphi\| \left[m \sup_{x \in \Gamma(\epsilon)} \frac{h^2(x)}{H(x)} + \epsilon^2 m^2 N \right] . \end{aligned}$$

Hieraus erhalten wir

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sup_{\mu \in C_m^N} |Q(\varphi, \mu) - Q^N(\varphi, \mu)| = \lim_{N \rightarrow \infty} \sup_{\mu \in C_m^N} \frac{1}{2N} \left| \int_{\mathcal{Z}} q_2(\varphi, x, x) \mu(dx) \right| = 0 .$$

□

Beweis des Theorems 1.20. Sei $\varphi \in C_c(\mathcal{Z})$ und M_φ^N gegeben durch (1.73). Zu $\epsilon > 0$ und $t \geq 0$ wählen wir $m \geq 1$ gemäß Lemma 1.30, so dass

$$\inf_N P(\sigma_m^N > t) \geq 1 - \frac{\epsilon}{2} .$$

Nach Theorem 1.19 ist die Folge X^N relativ kompakt. Wir nehmen an, dass die Teilfolge X^{N_l} in Verteilung gegen X konvergiert. Im folgenden verzichten wir auf den Subindex l . Die Abbildung M_φ sei durch (1.81) gegeben. Aus Lemma 1.32 und der Tschebyscheff-Ungleichung folgt für genügend große N

$$\begin{aligned}
& P \left(\sup_{s \leq t} |M_\varphi(X^N, s)| \geq \epsilon \right) \\
& \leq P \left(\sup_{s \leq t} |M_\varphi(X^N, s) - M_\varphi^N(s)| + |M_\varphi^N(s)| \geq \epsilon, \sigma_m^N > t \right) + \frac{\epsilon}{2} \\
& \leq P \left(\int_0^t |Q(\varphi, X^N(s)) - Q^N(\varphi, X^N(s))| ds + \sup_{s \leq t} |M_\varphi^N(s)| \geq \epsilon, \sigma_m^N > t \right) + \frac{\epsilon}{2} \\
& \leq P \left(\sup_{s \leq t} |M_\varphi^N(s \wedge \sigma_m^N)| \geq \frac{\epsilon}{2} \right) + \frac{\epsilon}{2} \\
& \leq \frac{2}{\epsilon} \mathbb{E} \sup_{s \leq t} |M_\varphi^N(s \wedge \sigma_m^N)| + \frac{\epsilon}{2} .
\end{aligned}$$

Nach Lemma 1.30 ist der letzte Term kleiner ϵ für genügend großes N . Somit erhalten wir

$$\sup_{s \leq t} |M_\varphi(X^N, s)| \Rightarrow 0 .$$

Da M_φ nach Lemma 1.31(1) stetig ist, gilt f.s.

$$M_\varphi(X) \equiv 0 .$$

Nach Lemma 1.31(2) folgt weiter f.s.

$$M_\varphi(X) \equiv 0 , \quad \varphi \in C_c(\mathcal{Z}) , \quad (1.85)$$

und aus Bedingung (1.53) folgt f.s. $X(0) = \mu_0$. Schließlich ergibt sich aus (1.50) und (1.85), dass X die Gleichung (1.41)-(1.43) zur Anfangsbedingung μ_0 f.s. löst. \square

Kapitel 2

Anwendung auf die Koagulations-Fragmentationsgleichung

Die diskrete Koagulation-Fragmentationsgleichung (K-F-Gleichung) mit Quellen und Senken ist gegeben durch

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} c(t, x) &= \frac{1}{2} \sum_{y=1}^{x-1} K(x-y, y) c(t, x-y) c(t, y) - \sum_{y=1}^{\infty} K(x, y) c(t, x) c(t, y) \\ &\quad + \sum_{y=1}^{\infty} F(x, y) c(t, x+y) - \frac{1}{2} \sum_{y=1}^{x-1} F(x-y, y) c(t, x) \\ &\quad - E(x) c(t, x) + S(x) \\ c(0, x) &= c_0(x) .\end{aligned}\tag{2.1}$$

Hierbei bezeichnen die Funktionen K und $F : \mathcal{Z} \times \mathcal{Z} \rightarrow [0, \infty)$ die Koagulations- bzw. Fragmentationsraten, die Funktionen S und $E : \mathcal{Z} \rightarrow [0, \infty)$ die Quell- und Abflußraten und $\mathcal{Z} = \mathbb{N}$ den Typenraum der Cluster. Die ersten beiden Terme stimmen mit den Gewinn- und Verlusttermen aus Smoluchowskis Koagulationsgleichung überein. Die Rate des Zerfalls eines $(x+y)$ -Clusters in zwei Cluster der Größe x und y wird durch $F(x, y)$ bestimmt. Die Zunahme der Konzentration der x -Cluster infolge des Zerfalls größerer Teilchen führt zu dem dritten Term und ihre Abnahme infolge des Zerfalls der x -Cluster zu dem vierten Term. Die letzten beiden Terme repräsentieren den Verlust und Gewinn, der aus dem Vorhandensein von Senken und Quellen resultiert.

Ersetzt man in (2.1) sämtliche Summen durch Integrale und wählt den Typenraum $\mathcal{Z} = (0, \infty)$, so erhält man die kontinuierliche K-F-Gleichung mit Quellen und Senken

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} c(t, x) &= \frac{1}{2} \int_0^x K(x-y, y) c(t, x-y) c(t, y) dy - \int_0^{\infty} K(x, y) c(t, x) c(t, y) dy \\ &\quad + \int_0^{\infty} F(x, y) c(t, x+y) dy - \frac{1}{2} \int_0^x F(x-y, y) c(t, x) dy \\ &\quad - E(x) c(t, x) + S(x) \\ c(0, x) &= c_0(x) .\end{aligned}\tag{2.2}$$

Die K-F-Gleichung wird in einer Vielzahl von Publikationen (z.B. [1], [88], [8], [18], [24]) behandelt. Quellen, Senken oder zeitabhängige Raten finden u.a. in [97], [86], [37] und [23] Berücksichtigung. Die Koagulationsgleichung mit multipler Fragmentation erschien erstmals in [74]. Multiple Fragmentation läßt sich mithilfe einer größenabhängigen Gesamtfragmentationsrate und einer Dichte für die erwartete Anzahl von Fragmenten ausdrücken und ist im Fall binärer Fragmentation äquivalent zu der hier gewählten Darstellung mittels eines Fragmentationskerns (siehe [100]). Sie läßt sich mühelos in unser allgemeines Modell integrieren, soll aber im folgenden nicht weiter betrachtet werden.

In diesem Kapitel ordnen wir die K-F-Gleichung in das nichtlineare Modell aus Abschnitt 1.4 ein und wenden die dort bereitgestellten Resultate unter mehreren Aspekten an. Zunächst etablieren wir die Approximationseigenschaften der zugehörigen K-F-Prozesse. Ähnliche stochastische Resultate finden sich unter Verzicht auf Quellen und Senken u.a. in [45], [50], [75] und [26]. In [3] wird ausführlich das Verhältnis zwischen Koagulationsgleichung und Marcus-Lushnikov-Prozeß dargestellt. Wir werden wesentliche Resultate und offene Fragen in bezug auf Konvergenz und Gelation wiedergeben. Diese Zusammenfassung trägt zum näheren Verständnis bei und ist hilfreich bei der numerischen Analyse der Koagulationsgleichung.

Anschließend werden wir Existenzresultate unter Zuhilfenahme der stochastischen Teilchensysteme herleiten. Diese Vorgehensweise wurde bereits in [50] erfolgreich umgesetzt, um die Existenz gelierender Lösungen für die diskrete Koagulationsgleichung zu zeigen. Ein detaillierter Vergleich mit bisherigen Veröffentlichungen zeigt, dass sich auch im Fall der K-F-Gleichung neue Existenzresultate erzielen lassen.

In dem letzten Abschnitt stellen wir ein alternatives Teilchensystem vor, welches aus einer einfachen, in [5] vorgestellten Transformation der Koagulationsgleichung hervorgeht. Im Gegensatz zum Marcus-Lushnikov-Prozeß repräsentieren die einzelnen Teilchen allerdings keine physischen Cluster. Dieses Modell scheint einerseits von theoretischer Bedeutung für das Verständnis des Gelationsphänomens zu sein. Andererseits liefern die entsprechenden Approximationsresultate die Grundlage für seine numerische Anwendung auf die Koagulationsgleichung und besitzen somit vorbereitenden Charakter.

2.1 Koagulation-Fragmentationsprozeß

Wir leiten zunächst eine schwache Form der K-F-Gleichung für den kontinuierlichen Fall $\mathcal{Z} = (0, \infty)$ her. Dazu setzen wir die Stetigkeit sämtlicher Ratenfunktionen und die Symmetrie

$$K(x, y) = K(y, x), \quad F(x, y) = F(y, x), \quad x, y \in \mathcal{Z}, \quad (2.3)$$

voraus. Die Multiplikation mit der Funktion $\varphi \in C_c(\mathcal{Z})$ und die Integration bzgl. x führt die Koagulationsterme aus Gleichung (2.2) in den Ausdruck

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^x \varphi(x) K(x-y, y) c(t, x-y) c(t, y) dy dx \\ & - \int_0^\infty \int_0^\infty \varphi(x) K(x, y) c(t, x) c(t, y) dy dx \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^\infty [\varphi(x+y) - \varphi(x) - \varphi(y)] K(x, y) c(t, x) c(t, y) dy dx$$

über. Dabei wurde

$$\int_0^\infty \int_0^x g(x-y, y) dy dx = \int_0^\infty \int_0^\infty g(x, y) dy dx$$

und die Symmetrie von K benutzt. Die gleiche Transformation unter Verwendung der Symmetrie von F ergibt für die Fragmentationsterme den Ausdruck

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty \int_0^\infty \varphi(x) F(x, y) c(t, x+y) dy dx - \frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^x \varphi(x) F(x-y, y) c(t, x) dy dx \\ &= \frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^\infty [\varphi(x) + \varphi(y)] F(x, y) c(t, x+y) dy dx \\ & \quad - \frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^x \varphi(x) F(x-y, y) c(t, x) dy dx \\ &= \frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^x [\varphi(x-y) + \varphi(y) - \varphi(x)] F(x-y, y) c(t, x) dy dx . \end{aligned}$$

Ist $c(t, x)$ eine Lösung der Gleichung (2.2), so erfüllt $\mu(t, dx) = c(t, x) dx$ den obigen Umformungen zufolge die Gleichung

$$\langle \varphi, \mu(t) \rangle = \langle \varphi, \mu_0 \rangle + \int_0^t Q(\varphi, \mu(s)) ds, \quad t \geq 0, \varphi \in C_c(\mathcal{Z}), \quad (2.4)$$

wobei $\mu_0(dx) = c_0(x) dx$,

$$\begin{aligned} Q(\varphi, \mu) &= \frac{1}{2} \int_{\mathcal{Z}} \int_{\mathcal{Z}} [\varphi(x+y) - \varphi(x) - \varphi(y)] K(x, y) \mu(dx) \mu(dy) \\ & \quad + \frac{1}{2} \int_{\mathcal{Z}} \int_{\mathcal{Z} \cap (0, x)} [\varphi(x-y) + \varphi(y) - \varphi(x)] F(x-y, y) \Lambda(dy) \mu(dx) \\ & \quad - \int_{\mathcal{Z}} \varphi(x) E(x) \mu(dx) + \int_{\mathcal{Z}} \varphi(x) S(x) \Lambda(dx) \end{aligned} \quad (2.5)$$

und Λ das Lebesgue-Maß auf $(0, \infty)$ bezeichne. Analog zum kontinuierlichen Fall erhalten wir aus der diskreten Gleichung (2.1) die schwache Form (2.4)-(2.5), falls wir $\mathcal{Z} = \mathbb{N}$ setzen und $\Lambda \in \mathcal{M}(\mathbb{N})$ durch

$$\Lambda(B) = \#B, \quad B \subset \mathbb{N},$$

definieren. Dies ermöglicht die simultane Behandlung des diskreten und kontinuierlichen Falls. Eine maßwertige Abbildung $\mu \in C([0, \infty), \mathcal{M}(\mathcal{Z}))$ heißt Lösung der K-F-Gleichung (2.4)-(2.5) zur Anfangsbedingung $\mu_0 \in \mathcal{M}(\mathcal{Z})$, falls für jedes $t \geq 0$ und $\varphi \in C_c(\mathcal{Z})$ sämtliche Integrale in (2.5) bzgl. $\mu(t)$ existieren, falls $Q(\varphi, \mu(\cdot))$ integrierbar auf $[0, t]$ ist und falls μ die Gleichung (2.4) erfüllt.

2.1.1 Approximationseigenschaften

Sei Ξ durch (1.32) gegeben. Für $x, y \in \mathcal{Z}$ und $B \in \mathcal{B}(\Xi)$ definieren wir

$$\begin{aligned}\lambda_0(B) &= \int_{\mathcal{Z}} 1_B(\delta_x) S(x) \Lambda(dx) , \\ \lambda_1(x, B) &= \frac{1}{2} \int_{\mathcal{Z} \cap (0, x)} 1_B(\delta_{x-y} + \delta_y) F(x-y, y) \Lambda(dy) + 1_B(0) E(x) \quad \text{und} \quad (2.6) \\ \lambda_2(x, y, B) &= K(x, y) 1_B(\delta_{x+y}) ,\end{aligned}$$

wobei 0 das Nullmaß bezeichne. Weiterhin sei durch

$$f(x) = \frac{1}{2} \int_{\mathcal{Z} \cap (0, x)} F(x-y, y) \Lambda(dy) , \quad x \in \mathcal{Z} , \quad (2.7)$$

die Gesamtfragmentationsrate eines x -Clusters gegeben. Es sei an dieser Stelle zu dem kontinuierlichen Fall bemerkt, dass aus der Stetigkeit von F nicht notwendigerweise die Stetigkeit von f folgt.

Lemma 2.1 *K, F, f, E und S seien stetig und es gelte $\langle S, \Lambda \rangle < \infty$. Dann erfüllen λ_0, λ_1 und λ_2 die Bedingungen (1.33) und (1.54) und $\mu \in C([0, \infty), \mathcal{M}_b(\mathcal{Z}))$ löst genau dann die K - F -Gleichung (2.4)-(2.5), wenn μ die nichtlineare Gleichung (1.41)-(1.43) löst.*

Beweis. Offensichtlich gilt

$$\lambda_0, \lambda_1(x), \lambda_2(x, y) \in \mathcal{M}_b(\Xi) , \quad x, y \in \mathcal{Z} ,$$

und $\lambda_2(\cdot, \cdot, B) \in M(\mathcal{Z} \times \mathcal{Z})$ für jedes $B \in \mathcal{B}(\Xi)$. Nach Lemma A.5 ist $\lambda_1(\cdot, B)$ ebenfalls meßbar. Weiterhin sind die Funktionen

$$\lambda_1(x, \Xi) = f(x) + E(x) \quad \text{und} \quad \lambda_2(x, y, \Xi) = K(x, y) \quad (2.8)$$

stetig und somit Bedingung (1.33) erfüllt. Sei $\varphi \in C_c(\mathcal{Z})$. Dann gilt

$$\int_{\Xi} \langle \varphi, \xi \rangle \lambda_1(x, d\xi) = \frac{1}{2} \int_{\mathcal{Z} \cap (0, x)} [\varphi(x-y) + \varphi(y)] F(x-y, y) \Lambda(dy) \quad (2.9)$$

und

$$\int_{\Xi} \langle \varphi, \xi \rangle \lambda_2(x, y, d\xi) = \varphi(x+y) K(x, y) . \quad (2.10)$$

Es läßt sich leicht zeigen, dass die Stetigkeit von F zusammen mit der Beschränktheit von f auf kompakten Mengen die Stetigkeit von (2.9) nach sich zieht. Mit der Stetigkeit der Funktionen (2.8), (2.9) und (2.10) ist Bedingung (1.54) erfüllt. Außerdem folgt aus (2.8), (2.9), (2.10) und

$$\int_{\Xi} \langle \varphi, \xi \rangle \lambda_0(d\xi) = \int_{\mathcal{Z}} \varphi(x) S(x) \Lambda(dx)$$

die Übereinstimmung der Ausdrücke (2.5) und (1.42). \square

Unter den Voraussetzungen des Lemmas 2.1 gibt es nach Lemma A.8 einen kompakt-beschränkten Kern λ^N , der für jedes $\mu \in E^N$ und $\Phi \in C_b(E^N)$ der Gleichung (1.35) genügt. Damit ergibt sich unmittelbar die Darstellung

$$\begin{aligned} \int_{E^N} [\Psi(\mu_2) - \Psi(\mu)] \lambda^N(\mu, d\mu_2) &= \frac{1}{2N} \sum_{1 \leq i \neq j \leq n} [\Psi(J_K(\mu, x_i, x_j)) - \Psi(\mu)] K(x_i, x_j) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \int_{\mathcal{Z} \cap (0, x_i)} [\Psi(J_F(\mu, x_i, y)) - \Psi(\mu)] F(x_i - y, y) \Lambda(dy) \\ &+ \sum_{i=1}^n [\Psi(J_E(\mu, x_i)) - \Psi(\mu)] E(x_i) + N \int_{\mathcal{Z}} [\Psi(J_S(\mu, x)) - \Psi(\mu)] S(x) \Lambda(dx) . \end{aligned} \quad (2.11)$$

Hierbei sind die Folgezustände von $\mu \in E^N$ gemäß Koagulation, Fragmentation, Ab- und Zufluß der Reihe nach durch

$$\begin{aligned} J_K(\mu, x, y) &= \mu + N^{-1} [\delta_{x+y} - \delta_x - \delta_y] , \\ J_F(\mu, x, y) &= \mu + N^{-1} [\delta_{x-y} + \delta_y - \delta_x] , \\ J_E(\mu, x) &= \mu - N^{-1} \delta_x \quad \text{und} \\ J_S(\mu, x) &= \mu + N^{-1} \delta_x \end{aligned}$$

gegeben. Das Verhalten des minimalen Sprungprozesses bzgl. λ^N läßt sich somit folgendermaßen beschreiben: Zwei Teilchen x_i und x_j , $1 \leq i \neq j \leq n$, koagulieren mit Rate $K(x_i, x_j)/2N$. Weiterhin zerfällt x_i in die Teilchen $y < x_i$ und $x_i - y$ oder wird dem System entnommen gemäß den Fragmentations- bzw. Abflußraten. Mit Rate $NS(x)\Lambda(dx)$ wird schließlich ein neues Teilchen x produziert. Falls $F \equiv 0$ und $E \equiv S \equiv 0$, entspricht dieser Sprungprozeß dem in der Einleitung vorgestellten Marcus-Lushnikov-Prozeß.

Es gelte (1.46). Das Teilchensystem X^N definieren wir analog zu Abschnitt 1.4 mittels dem minimalen Sprungprozeß und (1.14) und läßt sich wieder als $D([0, \infty), \mathcal{M}(H, h))$ -wertige Zufallsvariable auffassen. Im nächsten Theorem stellen wir seine Approximationseigenschaften bzgl. der K-F-Gleichung unter möglichst allgemeinen Bedingungen an die einzelnen Raten vor.

Theorem 2.2 *Sei $\mathcal{Z} = \mathbb{N}$ oder $\mathcal{Z} = (0, \infty)$ und*

$$h, H \in C(\mathcal{Z}), \text{ so dass } h \geq 0, H > 0, \frac{1}{H} \in C_0(\mathcal{Z}) \text{ und } \frac{h}{H} \in C_0(\mathcal{Z}).$$

Weiterhin sei $\frac{H(x)}{x}$ monoton fallend. K, F, f, E und S seien stetig und genügen den Wachstumsbedingungen

$$K(x, y) \leq h(x) h(y), \quad f(x) \leq h(x), \quad E(x) \leq h(x), \quad \int_{\mathcal{Z}} H(x) S(x) \Lambda(dx) < \infty. \quad (2.12)$$

Es gebe ein $c > 0$ mit der Eigenschaft

$$\int_{\mathcal{Z} \cap (0, x)} [H(x - y) + H(y) - H(x)] F(x - y, y) \Lambda(dy) \leq c H(x). \quad (2.13)$$

Sei $\mu_0 \in \mathcal{M}(H)$ und $\nu_0^N \in \mathcal{P}(E^N)$ eine Folge mit der Eigenschaft

$$\nu_0^N \Rightarrow \mu_0 \quad \text{und} \quad \sup_N \int_{E^N} \langle H, \mu \rangle \nu_0^N(d\mu) < \infty. \quad (2.14)$$

Dann ist der minimale Sprungprozeß bzgl. λ^N und ν_0^N regulär, die Folge X^N ist relativ kompakt und jeder schwache Limes löst fast sicher die K-F-Gleichung (2.4)-(2.5) zur Anfangsbedingung μ_0 .

In mehreren Publikationen vorwiegend der letzten Jahre werden ähnliche Teilchensysteme allerdings ohne Berücksichtigung von Quellen und Senken betrachtet: Filippov untersucht in [34] reine Fragmentationsprozesse. Guias [44], [45], [46] leitet Fehlerschranken für die erwartete Abweichung von der Lösung der diskreten K-F-Gleichung unter der Voraussetzung her, dass die Gesamtfragmentationsrate beschränkt ist und $K(x, y) \leq c x^{1/2} y^{1/2}$ gilt. Die Approximationsresultate von Jeon [50] für die diskrete K-F-Gleichung und von Norris [75] für die schwache Form der kontinuierlichen Koagulationsgleichung sind weitgehend in Theorem 2.2 enthalten. Darüberhinaus wird in [43] und [25] das stationäre Verhalten der Teilchensysteme analysiert.

Die K-F-Gleichung wird bereits in [26] simultan für den diskreten und kontinuierlichen Fall behandelt. Die Unterschiede liegen in der Darstellung der Fragmentationsterme mittels einem Fragmentationsmaß und in der Beschränkung der Gesamtteilchenzahl, welche zu beschränkten Sprungraten führt und im Limes zurückgenommen wird. Der in dieser Arbeit gewählte Zugang über den minimalen Sprungprozeß ermöglicht die problemlose Einbindung von Quellen und Senken.

Wir werden die allgemeinen Bedingungen aus Theorem 2.2 im nächsten Abschnitt im Fall der Koagulationsgleichung und im Abschnitt 2.2.1 unter dem Aspekt neuer Existenzresultate eingehend diskutieren.

Beweis. Seien λ_0 , λ_1 und λ_2 durch (2.6) gegeben. Die Voraussetzungen $\frac{1}{H} \in C_0(\mathcal{Z})$ und $\int_{\mathcal{Z}} H(x) S(x) \Lambda(dx) < \infty$ implizieren

$$\lambda_0(\Xi) = \langle S, \Lambda \rangle < \infty.$$

Nach Lemma 2.1 sind die Bedingungen (1.33) und (1.54) erfüllt. Für beliebiges $\mu \in E^N$ erhalten wir aus (2.11)

$$\begin{aligned} & \int_{E^N} [\langle H, \mu_2 \rangle - \langle H, \mu \rangle] \lambda^N(\mu, d\mu_2) \\ &= \frac{1}{2N^2} \sum_{1 \leq i \neq j \leq n} [H(x_i + x_j) - H(x_i) - H(x_j)] K(x_i, x_j) \\ & \quad + \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^n \int_{\mathcal{Z} \cap (0, x_i)} [H(x_i - y) + H(y) - H(x_i)] F(x_i - y, y) \Lambda(dy) \\ & \quad - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n H(x_i) E(x_i) + \int_{\mathcal{Z}} H(x) S(x) \Lambda(dx). \end{aligned} \quad (2.15)$$

Da $\frac{H(x)}{x}$ monoton fallend ist, gilt

$$H(x+y) = x \frac{H(x+y)}{x+y} + y \frac{H(x+y)}{x+y} \leq H(x) + H(y)$$

und nach (2.13)

$$\int_{E^N} [\langle H, \mu_2 \rangle - \langle H, \mu \rangle] \lambda^N(\mu, d\mu_2) \leq \frac{c}{2} \langle H, \mu \rangle + \int_{\mathcal{Z}} H(x) S(x) \Lambda(dx) . \quad (2.16)$$

Nach Voraussetzung ist das zweite Integral auf der rechten Seite endlich. Mit (2.16) und (2.14) ist Bedingung (1.38) gleichmäßig in N erfüllt. Weiterhin folgt aus (2.12)

$$\lambda_1(x, \Xi) = f(x) + E(x) \leq 2h(x) \quad \text{und} \quad \lambda_2(x, y, \Xi) = K(x, y) \leq h(x)h(y) .$$

Damit sind sämtliche Voraussetzungen des Korollars 1.18 und des Theorems 1.20 gegeben und die gewünschten Aussagen folgen unter Berücksichtigung des Lemmas 2.1. \square

2.1.2 Konvergenz und Gelation

Im Fall der Koagulationsgleichung

$$\begin{aligned} \langle \varphi, \mu(t) \rangle &= \langle \varphi, \mu_0 \rangle + \frac{1}{2} \int_0^t \int_{\mathcal{Z}} \int_{\mathcal{Z}} [\varphi(x+y) - \varphi(x) - \varphi(y)] K(x, y) \mu(s, dx) \mu(s, dy) ds \\ &\quad t \geq 0, \varphi \in C_c(\mathcal{Z}) \end{aligned} \quad (2.17)$$

besteht ein relativ vollständiges Bild bzgl. Existenz, Eindeutigkeit und Konvergenz. In diesem Abschnitt wollen wir die vorhandenen Resultate kurz vorstellen und offene Fragen formulieren.

Aus Gleichung (2.17) ergibt sich für $\varphi(x) = x$ formal die Erhaltung der Masse

$$m_1(t) := \int_{\mathcal{Z}} x \mu(t, dx) = \int_{\mathcal{Z}} x \mu(0, dx), \quad t \geq 0 .$$

Die Lösung der diskreten Gleichung zum Produktkern $K(x, y) = xy$ und zur monodispersen Anfangsverteilung $\mu_0 = \delta_1$ zeigt jedoch überraschenderweise ein anderes Verhalten. Sie besitzt die Dichte (siehe [71], [56])

$$c(t, x) = \begin{cases} \frac{x^{x-2}}{x!} t^{x-1} \exp(-xt) & : 0 \leq t \leq 1, \\ \frac{x^{x-2}}{x!} \exp(-x) t^{-1} & : 1 < t, \end{cases} \quad (2.18)$$

und die Gesamtmasse

$$m_1(t) = \begin{cases} 1 & : 0 \leq t \leq 1, \\ \frac{1}{t} & : 1 < t. \end{cases}$$

Die Gesamtmasse ist also konstant bis zum Zeitpunkt $t_g = 1$ und danach streng fallend. Dieses Phänomen läßt sich ebenfalls für Koagulationskerne der Form

$$K(x, y) = (Ax + B)(Ay + B), \quad A > 0, B \geq 0 ,$$

beobachten, die auf das in der Einleitung erwähnte Polymermodell von Flory und Stockmayer zurückgehen. Nach [64] beginnt der Masseverlust zum Zeitpunkt

$$t_g = \left[A \sum_{x=1}^{\infty} (Ax + B) x \mu_0(\{x\}) \right]^{-1}. \quad (2.19)$$

Vor diesem Hintergrund führen wir zu einer beliebigen Lösung μ der Koagulationsgleichung den sogenannten Gelationszeitpunkt

$$t_g = \inf \{t \geq 0 : m_1(t) < m_1(0)\}$$

ein. Wir sagen, Gelation tritt ein oder μ ist gelierend, falls t_g endlich ist. Weiter heißt der Koagulationskern K gelierend, falls eine gelierende Lösung existiert. Es drängen sich nun zwei Fragen auf: 1. Wie läßt sich bzgl. der deterministischen Koagulationsgleichung die Klasse der gelierenden Kerne charakterisieren? 2. Wie läßt sich das Gelationsphänomen insbesondere aus Sicht des masseerhaltenden Koagulations- bzw. Marcus-Lushnikov-Prozesses interpretieren?

Zur Beantwortung der ersten Frage betrachten wir zunächst den diskreten Fall. Für Kerne $K(x, y) \leq c x^\alpha y^\alpha$, $c > 0$, $\alpha < 1/2$, wurde in [65] bewiesen, dass sämtliche Lösungen zur monodispersen Anfangsbedingung die Masse erhalten. Allgemeiner geht die Existenz einer masseerhaltenden Lösung für den sublinearen Kern

$$K(x, y) \leq c(x + y)$$

auf White [97] für Anfangsbedingungen mit endlichem r -ten Moment, $r > 1$, und auf Ball und Carr [8] für Anfangsbedingungen mit endlicher Gesamtmasse zurück. Die Eindeutigkeit wird in [8] für $K(x, y) \leq c x^{1/2} y^{1/2}$ und in [48] für sublineare Kerne bewiesen.

Für $K(x, y) = O(x)O(y)$ wird die Existenz einer Lösung zur monodispersen Anfangsbedingung in [72] und zu einer Anfangsbedingung, die nur endliche Gesamtkonzentration besitzt, in [61] gezeigt. Die globale Eindeutigkeit ist für den Produktkern zwar bekannt (siehe [56]), für allgemeine nicht-sublineare Kerne jedoch ein offenes Problem.

Die Vermutung, dass der Kern $K(x, y) = x^\alpha y^\alpha$ für $\alpha > 1/2$ gelierend ist, geht auf Leyvraz und Tschudi [65] zurück (siehe auch [49]). In der heutigen Literatur geht man davon aus (siehe z.B. [3, Abschnitt 2.3]), dass homogene Koagulationskerne zum Grad $\gamma \leq 1$ masseerhaltend und zum Grad $\gamma > 1$ gelierend sind. Dabei heißt K homogen zum Grad γ , falls

$$K(cx, cy) = c^\gamma K(x, y), \quad c > 0, x, y \in \mathcal{Z}. \quad (2.20)$$

Ein mathematischer Beweis von Leyvraz und Tschudis Vermutung gelang erstmals in [50]. Unter Verwendung geeigneter Abschätzungen für die Koagulationsprozesse war Jeon in der Lage, die Existenz gelierender Lösungen für Kerne zu zeigen, die der Bedingung

$$\exists \alpha > 1/2, c, C > 0 \quad : \quad c x^\alpha y^\alpha \leq K(x, y) \leq C x y$$

genügen.

Für die kontinuierliche Koagulationsgleichung mit $K(x, y) = o(x) o(y)$ wird die Existenz einer Lösung von Galkin und Dubovskii [38] gezeigt. Existenz- und Eindeutigkeitsresultate gibt Norris [75] u.a. für den Fall, dass

$$K(x, y) \leq H(x) H(y) \quad \text{und} \quad T := \langle H^2, \mu_0 \rangle^{-1} > 0$$

gilt, wobei H eine positive, stetige Funktion und $\frac{H(x)}{x}$ monoton fallend sei. Dann existiert eine eindeutige schwache Lösung auf dem Intervall $[0, T)$, für die $\int_0^t \langle H^2, \mu(s) \rangle ds < \infty$, $t < T$, gilt. Für $H(x) = x$ läßt sich leicht $t_g \geq T$ zeigen. Die Übereinstimmung von t_g mit dem Divergenzzeitpunkt höherer Momente wird zwar vermutet, ist für allgemeine gelierende Kerne jedoch noch nicht bewiesen. Escobedo, Mischler und Perthame [32] zeigen, dass jede schwache Lösung geliert, falls Konstanten $c > 0$ und $0 \leq \alpha \leq \beta \leq 1$ existieren, so dass $\alpha + \beta > 1$ und

$$K(x, y) \geq c [x^\alpha y^\beta + x^\beta y^\alpha] .$$

Um das Gelationsphänomen aus stochastischer Sicht zu verstehen und eine partielle Antwort auf die zweite Frage zu geben, kehren wir zum diskreten Fall zurück und betrachten der Einfachheit halber Kerne der Form

$$K(x, y) = x^\alpha y^\alpha, \quad \alpha \geq 0 .$$

Ball und Carr wählen in [8] einen Lösungsbegriff, der zu unserer schwachen Lösung äquivalent ist. Für $\alpha \leq 1/2$ folgt aus ihrem Eindeutigkeitsresultat und aus Theorem 2.2 unmittelbar die Konvergenz der Koagulationsprozesse gegen die eindeutige masseerhaltende Lösung der Koagulationsgleichung.

Den Fall $\alpha \in (1/2, 1)$ stellen wir für einen Moment zurück und wenden uns dem ergebnisreichen Fall $\alpha = 1$ zu. Außerdem starten wir den Koagulationsprozeß mit N Monomerteilchen. Die Konvergenz läßt sich in diesem Fall auf die Arbeit [30] zurückspielen, die grundlegend für die Theorie der zufälligen Graphen ist. Darin betrachten Erdős und Rényi eine Markovkette auf dem Zustandsraum aller Graphen mit N Knoten und untersuchen u.a. die Konvergenz der Anzahl aller Bäume x -ter Ordnung und das Verhalten der größten zusammenhängenden Komponente im Limes $N \rightarrow \infty$. Eine leichte Modifikation ihres Modells (siehe [13] und [3, Abschnitt 4.4]) führt zu der Aussage, dass die Koagulationsprozesse gegen die Dichte

$$\hat{c}(t, x) = \frac{x^{x-2}}{x!} t^{x-1} \exp(-xt), \quad t \geq 0, \quad (2.21)$$

konvergieren, welche allerdings mit der eindeutigen Lösung (2.18) der Koagulationsgleichung nur bis zum Zeitpunkt $t_g = 1$ übereinstimmt und die Gesamtmasse

$$\hat{m}_1(t) = \begin{cases} 1 & : 0 \leq t \leq 1, \\ \frac{t^*}{t} & : 1 < t, \end{cases}$$

besitzt. Hierbei ist $t^* = t^*(t)$ eindeutig durch die Gleichung

$$t^* \exp(-t^*) = t \exp(-t), \quad t^* \in (0, 1), t > 1,$$

gegeben.

Das unerwartete Konvergenzverhalten in der Post-Gelationsphase resultiert aus der Koagulation der einzelnen Cluster mit dem Cluster maximaler Größe, die wir mit $M_1^N(t)$ bezeichnen wollen. Analog zu [30, Theorem 7a und 9b] gilt

$$\lim_{N \rightarrow \infty} P \left(\left| \frac{M_1^N(t)}{N} - \hat{g}(t) \right| > \epsilon \right) = 0, \quad \epsilon > 0, t \geq 0, \quad (2.22)$$

wobei

$$\hat{g}(t) = 1 - \hat{m}_1(t).$$

Danach kann der maximale Cluster mit der Gelmasse $\hat{g}(t)$ identifiziert werden und ist für $t > t_g$ von gleicher Ordnung wie N , womit er eine im Limes positive Koagulationsintensität beibehält. Dieser Einfluß schlägt sich besonders deutlich in der Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{c}(t, x) = \frac{1}{2} \sum_{y=1}^{x-1} (x-y) y \hat{c}(t, x-y) \hat{c}(t, y) - x \hat{c}(t, x) \quad (2.23)$$

nieder, welche die Funktion (2.21) nach [91] eindeutig löst. Im Unterschied zu Smoluchowskis Koagulationsgleichung (2) kompensiert der Verlustterm in Gleichung (2.23) den Masseverlust und modelliert die Koagulation der Cluster endlicher Größe, der sogenannten Sol-Cluster, sowohl untereinander als auch mit dem Gel-Cluster.

Der Post-Gelationsphase liegen somit unterschiedliche Auffassungen über die Reaktivität zwischen Sol und Gel zugrunde. Ähnliche Überlegungen führen für den Kern (3) aus der Einleitung zu verschiedenen Fortsetzungen der Lösung nach dem Gelationszeitpunkt (2.19): Stockmayer [90] geht davon aus, dass das Sol nicht mit dem Gel chemisch reagiert, und leitet eine Polymerverteilung her, die Smoluchowskis Koagulationsgleichung über den Gelationszeitpunkt hinaus löst. Ziff und Stell [102] stellen die exakte Lösung einer Koagulationsgleichung vor, welche die Sol-Gel-Reaktivität im obigen Sinne berücksichtigt. Florys Annahme, dass das Gel mit sich selbst reagieren und Zyklen ausbilden kann, womit seine Reaktivität gegenüber den Sol-Clustern herabgesetzt wird, führt schließlich zu einer dritten Verteilung (siehe [36] und [99]).

Ist $\alpha > 1$, so folgt nach [51], dass

$$\lim_{N \rightarrow \infty} P(M_1^N(t) = N) = 1, \quad t > 0.$$

Dieses Verhalten nennt sich sofortige und vollständige Gelation und wird bereits in [21] für $\alpha = 3$ und in [87] für $\alpha > 1$ vermutet.

Die Voraussetzungen aus Theorem 2.2, dass $\frac{h}{H} \in C_0(\mathcal{Z})$ und $\frac{H(x)}{x}$ monoton fallend ist, schließen den Fall $\alpha \geq 1$ aus und sind gemäß den obigen Ergebnissen notwendig für die Konvergenz gegen die Lösung der Koagulationsgleichung. Der Fall $\alpha \in (1/2, 1)$ wird dagegen von dem Theorem erfaßt und die schwachen Limiten lösen dann fast sicher die Koagulationsgleichung. Ob die Koagulationsprozesse in der Post-Gelationsphase konvergieren und in welcher Weise sie den Masseverlust zum Ausdruck bringen, ist noch ungeklärt. Insbesondere stellt sich die Frage, ob das Gelationsphänomen tatsächlich mit der Formation eines Clusters von gleicher Größenordnung wie N einhergeht. Spekulationen darüber gehen auseinander und basieren zum Teil auf dem Wissen für $\alpha = 1$. In Abschnitt 3.2.3 setzen wir uns mit dieser offenen Frage numerisch auseinander.

2.2 Existenzresultate

Das Approximationstheorem aus dem letzten Abschnitt besagt, dass ein schwacher Limes der Koagulation-Fragmentationsprozesse existiert, der fast sicher die K-F-Gleichung löst. Hieraus folgt unmittelbar die Existenz einer Lösung. Wir werden die allgemein gehaltenen Voraussetzungen des Approximationstheorems separat für den diskreten und kontinuierlichen Fall durch einfachere Bedingungen ersetzen und neue Existenzresultate für die K-F-Gleichung erzielen.

Existenz- und Eindeigkeitsresultate ohne Berücksichtigung von Quellen und Senken wurden erstmals in [74] für beschränkte Raten gegeben. Analog zur Koagulationsgleichung stellt sich dabei die Frage nach der Masseerhaltung. Da Fragmentation der Koagulation entgegenwirkt, lassen sich Bedingungen an den Fragmentationskern angeben, unter denen die Masse selbst im Fall eines gelierenden Koagulationskerns konstant bleibt. Wir kommen darauf im zweiten Teil dieses Abschnitts zurück.

2.2.1 Berücksichtigung von Quellen und Senken

Im diskreten Fall ist die Stetigkeit der Ratenfunktionen und Bedingung (2.13) für die Wahl $H(x) = x$ trivialerweise erfüllt. Weiterhin existiert nach Lemma 1.26 eine Folge $\nu_0^N \in \mathcal{P}(E^N)$, für die (2.14) gilt. Somit erhalten wir aus Theorem 2.2 unmittelbar das folgende Korollar.

Korollar 2.3 *Sei $\mathcal{Z} = \mathbb{N}$, $\epsilon > 0$, $c > 0$, $H(x) = x$ und $h(x) = cx^{1-\epsilon}$. Es gelten die Wachstumsbedingungen*

$$K(x, y) \leq h(x)h(y), \quad f(x) \leq h(x), \quad E(x) \leq h(x), \quad \sum_{x=1}^{\infty} xS(x) < \infty.$$

Dann existiert zu jeder Anfangsbedingung $\mu_0 \in \mathcal{M}(H)$ eine Lösung $\mu \in C([0, \infty), \mathcal{M}(H, h))$ der K-F-Gleichung (2.4)-(2.5).

Falls keine Quellen und Senken vorhanden sind, stimmen die Voraussetzungen des Korollars mit denen aus [26, Korollar 2.3] und [50, Theorem 2] überein. Eine Verschärfung der Voraussetzungen an K erlaubt die Lockerung der Bedingungen an F und umgekehrt. Damit lassen sich weitere Existenzresultate erzielen, auf die wir im nächsten Abschnitt zurückkommen werden. Eindeigkeitsresultate finden sich in [8], [14] und [18].

Unter Hinzunahme von Quellen und Senken wird die allgemeinste Existenzaussage in [86] gegeben. Im Fall zeitunabhängiger Raten und binärer Fragmentation implizieren die dortigen Voraussetzungen, dass $K(x, y) = o(x)o(y)$, $E(x) = O(x)$, $\sum_{x=1}^{\infty} xS(x) < \infty$ und f beschränkt ist. Im Fall einer unbeschränkten Gesamtfragmentationsrate liefert Korollar 2.3 somit ein neues Existenzresultat.

Wir untersuchen nun den kontinuierlichen Fall.

Korollar 2.4 Sei $\mathcal{Z} = (0, \infty)$, $-1 < \alpha < 0$, $0 < \epsilon \leq |\alpha|$, $c > 0$, $H(x) = x^\alpha + x$ und $h(x) = c(x^{\alpha+\epsilon} + x^{1-\epsilon})$. K , F , E und S seien stetig und genügen den Wachstumsbedingungen

$$K(x, y) \leq h(x) h(y), \quad E(x) \leq h(x), \quad \int_0^\infty H(x) S(x) dx < \infty$$

und

$$F(x, y) \leq \frac{c}{(1+x+y)^\epsilon}. \quad (2.24)$$

Dann existiert zu jeder Anfangsbedingung $\mu_0 \in \mathcal{M}(H)$ eine Lösung $\mu \in C([0, \infty), \mathcal{M}(H, h))$ der K-F-Gleichung (2.4)-(2.5).

Beweis. Für $0 < x < \infty$ gilt

$$f(x) \leq \frac{c}{2(1+x)^\epsilon} x \leq h(x)$$

und

$$\begin{aligned} & \int_0^x [H(x-y) + H(y) - H(x)] F(x-y, y) dy \\ & \leq \frac{c}{(1+x)^\epsilon} \int_0^x [(x-y)^\alpha + y^\alpha] dy \leq \frac{2c}{\alpha+1} H(x). \end{aligned}$$

Weiterhin gilt nach (2.24)

$$\sup\{F(z-y, y) : x/2 \leq z \leq 2x, 0 < y < z\} < \infty,$$

weshalb die Stetigkeit von F die Stetigkeit von f im Punkt x nach sich zieht. Nach Lemma 1.26 existiert eine Folge $\nu_0^N \in \mathcal{P}(E^N)$, für die (2.14) gilt. Damit sind sämtliche Voraussetzungen des Theorems 2.2 erfüllt und die Existenz einer Lösung folgt. \square

Die kontinuierliche K-F-Gleichung ohne Quellen und Senken betrachten wir bereits in [26]. Die dort gewählte Darstellung des Fragmentationsterms und die Anfangsbedingung sind etwas allgemeiner; die Voraussetzungen implizieren jedoch $\sup_{x \leq x_0} K(x, y) < \infty$ für $x_0, y > 0$ und $f(x) \rightarrow 0$ für $x \rightarrow 0$. Ansonsten wird $K(x, y) = o(x)o(y)$ und $f(x) = o(x)$ für $x \rightarrow \infty$ gefordert, womit die Bedingungen im wesentlichen mit denen des Korollars 2.4 übereinstimmen.

Aus Korollar 2.4 bzw. [26, Korollar 2.3] ergibt sich ein neues Existenzresultat, da zuvor veröffentlichte Resultate, insbesondere in [88] und [24], die Sublinearität des Koagulationskerns zur Voraussetzung machen. Mittlerweile ist die Arbeit [62] erschienen, in der die Existenz einer Lösung für Kerne der Form

$$K(x, y) = k(x)k(y) + \alpha(x, y)$$

gezeigt wird. Die Bedingungen an den Fragmentationskern führen im Fall $k(x) = O(x)$ wieder zu $f(x) = o(x)$. An dieser Stelle möchten wir außerdem auf die Eindeigkeitsresultate in [89] und [24] und auf die Arbeit [70] verweisen, in der die Existenz einer Lösung

der Fragmentationsgleichung unter der Bedingung bewiesen wird, dass die Gesamtfragmentationsrate beschränkt auf beschränkten Intervallen ist.

Die bisher allgemeinste Existenzaussage hinsichtlich Quellen und Senken liefert [23, Theorem 2.2] unter der Voraussetzung, dass sowohl K als auch F einen kompakten Träger besitzen und dass die Anfangsbedingung und die Quellrate endliches r -tes Moment für ein $r \geq 1$ besitzen. Insofern verallgemeinert Korollar 2.4 den Fall $r = 1$ auf eine geeignete Klasse unbeschränkter Kerne.

2.2.2 Starke Fragmentation und Masseerhaltung

Quellen und Senken erhöhen bzw. verringern die Gesamtmasse. In diesem Abschnitt setzen wir ihre Raten gleich Null und widmen uns der Frage nach der Existenz von masseerhaltenden Lösungen der K-F-Gleichung, also von Lösungen mit der Eigenschaft

$$\int_{\mathcal{Z}} x \mu(t, dx) = \int_{\mathcal{Z}} x \mu(0, dx), \quad t \geq 0.$$

Fragmentation kann nach [34], [101] und [31] ebenfalls zu Masseverlust führen. Im Fall der kontinuierlichen Fragmentationsgleichung kann ein im Punkt $(0, 0)$ singulärer Fragmentationskern den Austritt von Teilchen linksseitig des Zustandsraums $(0, \infty)$ bewirken. Im folgenden betrachten wir nur die diskrete K-F-Gleichung und schließen damit diese Möglichkeit eines Masseverlusts aus. Die Wachstumsbedingung (2.12) für die Gesamtfragmentationsrate läßt sich abschwächen, falls der Koagulationskern sublinear ist und höhere Anfangsmomente existieren.

Theorem 2.5 *Sei $\mathcal{Z} = \mathbb{N}$, $E \equiv S \equiv 0$, $r \geq 2$ eine natürliche Zahl und $H(x) = x^r$. Weiterhin sei $c > 0$, $0 < \epsilon < 1$ und $h(x) = x^{r-\epsilon}$. Es gelte*

$$K(x, y) \leq c(x + y) \quad \text{und} \quad f = O(h). \quad (2.25)$$

Dann existiert zu jeder Anfangsbedingung $\mu_0 \in \mathcal{M}(H)$ eine masseerhaltende Lösung $\mu \in C([0, \infty), \mathcal{M}(H, h))$ der K-F-Gleichung (2.4)-(2.5).

Die Existenz einer masseerhaltenden Lösung der K-F-Gleichung im Fall eines sublinearen Koagulationskerns wurde in [8] sogar für beliebige Fragmentationskerne und Anfangsbedingungen mit endlicher Gesamtmasse gezeigt. Insofern dient das hier vorgestellte Theorem einzig und allein der Vollständigkeit. Überraschenderweise kann es weitere Lösungen mit steigender Masse geben, wie das Beispiel aus [7] zeigt. Um diesen Effekt auszuschließen wurde in [8] und [15] die hinreichende Bedingung der schwachen Fragmentation eingeführt.

Die starke Fragmentation wurde in [14] ursprünglich zur Untersuchung der Konvergenz einer Lösung ins Gleichgewicht verwendet. Dabei heißt der Kern F stark fragmentierend, falls ein $\gamma > 0$ existiert, so dass es für jedes $r \geq 0$ eine Konstante $c_r > 0$ gibt, für die

$$\sum_{y=1}^{\lfloor \frac{x-1}{2} \rfloor} y^r F(x-y, y) \geq c_r x^{\gamma+r}, \quad x \geq 3.$$

Zum Beispiel ist jeder Kern mit der Eigenschaft

$$F(x, y) \geq \frac{c}{(1+x+y)^{1-\gamma}} \quad (2.26)$$

für $c, \gamma > 0$ stark fragmentierend. Kerne der Form $F(x, y) = (x+y)^{\gamma-1}$ werden u.a. in [101] im Zusammenhang mit dem Zerfall von Polymerketten betrachtet.

Da Costa benutzt die Bedingung der starken Fragmentation, um die Existenz und Eindeutigkeit einer masseerhaltenden Lösung der K-F-Gleichung im Fall gelierender Kerne zu zeigen. In [18, Theorem 5.1 und 6.1] fordert er dazu, dass

$$K(x, y) \leq c x^\alpha y^\alpha$$

für ein $\alpha \in (1/2, 1]$ und ein $c > 0$ gilt und dass F stark fragmentierend für ein $\gamma > \alpha$ ist. Seine Voraussetzungen implizieren eine Gesamtfragmentationsrate von echt größerer Ordnung als x^α . Es ist allerdings zu erwarten, dass die Gesamtfragmentationsrate nur leicht angehoben werden muß, um die Existenz einer masseerhaltenden Lösung zu garantieren, falls $K(x, y) = x^\alpha y^\alpha$ und α geringfügig größer als $1/2$ ist. Das nächste Theorem ermöglicht einen in diesem Sinne gleitenden Übergang von nichtgelierenden zu gelierenden Koagulationskernen.

Theorem 2.6 *Sei $\mathcal{Z} = \mathbb{N}$, $E \equiv S \equiv 0$, $r \geq 2$ eine natürliche Zahl und $H(x) = x^r$. Weiterhin seien $c, c_{r-1} > 0$, $0 < \epsilon < 1$, $\alpha \geq 0$ und $\gamma \in \mathbb{R}$ Konstanten, die der Ungleichung $2\alpha - 1 < \gamma \leq r - \epsilon$ genügen, und $h(x) = x^{r-\epsilon}$. Es gelte*

$$K(x, y) \leq c x^\alpha y^\alpha \quad \text{und} \quad f = O(h) \quad (2.27)$$

und darüberhinaus

$$\sum_{y=1}^{\lfloor \frac{x-1}{2} \rfloor} y^{r-1} F(x-y, y) \geq c_{r-1} x^{\gamma+r-1}, \quad x \geq 3. \quad (2.28)$$

Dann existiert zu jeder Anfangsbedingung $\mu_0 \in \mathcal{M}(H)$ eine masseerhaltende Lösung $\mu \in C([0, \infty), \mathcal{M}(H, h))$ der K-F-Gleichung (2.4)-(2.5).

Man beachte, dass im Fall $\alpha \in [0, 1/2]$, also im Fall eines nichtgelierenden Koagulationskerns, nach (2.28) eine positive Gesamtfragmentationsrate erforderlich ist. Es läßt sich vermuten, dass die Voraussetzungen aus Theorem 2.6 die Existenz einer Lösung mit konstanter Masse garantiert, die darüberhinaus ein global beschränktes zweites Moment besitzt, d.h., für die

$$\sup_{0 \leq t < \infty} \int x^2 \mu(t, dx) < \infty$$

gilt. Möglicherweise sind die Voraussetzungen im Fall echt positiver Koagulations- und Fragmentationsraten sogar hinreichend für die Konvergenz dieser Lösung ins Gleichgewicht für $t \rightarrow \infty$.

Ist $\alpha \in (1/2, 1]$ und F stark fragmentierend für ein $\gamma > 2\alpha - 1$ und wächst f höchstens polynomial, so sind sämtliche Bedingungen des Theorems 2.6 für genügend großes r erfüllt. Theorem 2.6 verallgemeinert also Da Costas Existenztheorem für Anfangsbedingungen mit endlichem r -ten Moment. Unserer Erkenntnis nach ist [18] die einzige veröffentlichte Arbeit, die sich mit der Masseerhaltung im Fall gelierender Kerne auseinandersetzt. In seinem Vortrag [63] erwähnte Laurençot die Masseerhaltung für die kontinuierliche K-F-Gleichung unter der Voraussetzung, dass der Fragmentationskern Ungleichung (2.26) ebenfalls für ein $\gamma > 2\alpha - 1$ erfüllt. Möglicherweise ist seine Arbeit mittlerweile fertiggestellt.

Die Wahl $K(x, y) = xy$ und $F(x, y) = 1$ führt zu $\alpha = 1$ und $\gamma = 1$ in (2.27) bzw. (2.28). Aus der diskreten K-F-Gleichung (2.4)-(2.5) erhalten wir formal die Beziehung

$$m_0(t) = m_0(0) + \frac{1}{2} \int_0^t [m_1(s)(1 - m_1(s)) - m_0(s)] ds$$

zwischen der Gesamtkonzentration $m_0(t) = \mu(t, \mathcal{Z})$ und der Masse $m_1(t) = \int x \mu(t, dx)$ zur Zeit t . Gäbe es nun eine masseerhaltende Lösung mit $m_1(0) > 1$, so müßte $m_0(t)$ zwangsläufig negativ werden für genügend große t . Dieses Beispiel zeigt, dass wir im Fall $\alpha \in (1/2, 1]$ und $\gamma = 2\alpha - 1$ Masseerhaltung höchstens für Anfangsbedingungen mit genügend kleiner Gesamtmasse erwarten können.

Die Existenz gelierender Lösungen der kontinuierlichen K-F-Gleichung wird in [32, Theorem 1.4] thematisiert. Demzufolge sind die Bedingungen hinreichend, dass

$$K(x, y) \geq c x^\alpha y^\alpha \quad \text{und} \quad F(x, y) \leq \frac{c_2}{(1 + x + y)^{1-\gamma}}$$

für $c, c_2 > 0$, $\alpha \in (1/2, 1]$ und $\gamma \leq \alpha - 1/2$ und dass $m_1(0)$ genügend groß ist. Für den Fall $\gamma < \alpha - 1/2$ gehen die Autoren davon aus, dass Gelation sogar für alle Anfangsbedingungen eintritt. Für den Fall $\alpha - 1/2 \leq \gamma \leq 2\alpha - 1$ wird in Übereinstimmung mit dem obigen Beispiel die Existenz einer Konstanten m vermutet, so dass für $m_1(0) > m$ gelierende und für $m_1(0) \leq m$ masseerhaltende Lösungen existieren (siehe [32, Open Problem 2.10]).

Die Beweise der Theoreme 2.5 und 2.6 sind sich sehr ähnlich und sollen deshalb zusammengelegt werden. Zum Beweis benötigen wir noch das folgende Lemma.

Lemma 2.7 *Sei $\mathcal{Z} = (0, \infty)$ oder $\mathcal{Z} = \mathbb{N}$, $r \geq 2$ eine natürliche Zahl und $0 \leq \alpha \leq \beta$. Für jedes $\mu \in \mathcal{M}(\mathcal{Z})$ gilt*

$$\int_{\mathcal{Z}} \int_{\mathcal{Z}} [(x + y)^r - x^r - y^r] x^\alpha y^\beta \mu(dx) \mu(dy) \leq 2 r r! \int_{\mathcal{Z}} x \mu(dx) \int_{\mathcal{Z}} y^{\alpha+\beta+r-1} \mu(dy) .$$

Beweis. Für $s = 1, \dots, r - 1$ erhalten wir

$$x^{s+\alpha} y^{r-s+\beta} \leq x y^{\alpha+\beta+r-1}, \quad 0 < x \leq y ,$$

und

$$x^{s+\alpha} y^{r-s+\beta} \leq y x^{\alpha+\beta+r-1}, \quad 0 < y \leq x .$$

Somit gilt für alle $x, y > 0$

$$\begin{aligned} [(x+y)^r - x^r - y^r] x^\alpha y^\beta &= \sum_{s=1}^{r-1} \frac{r!}{s!(r-s)!} x^{s+\alpha} y^{r-s+\beta} \\ &\leq r! [x y^{\alpha+\beta+r-1} + y x^{\alpha+\beta+r-1}] . \end{aligned}$$

□

Beweis der Theoreme 2.5 und 2.6. Sei $\beta > 0$, so dass $\int x \mu_0(dx) \leq \beta$. Zu $\varphi(x) = x$ definieren wir gemäß Bemerkung 1.22 den Raum

$$\mathcal{M}_\beta(H) = \{\mu \in \mathcal{M}(\mathcal{Z}) : \langle \varphi, \mu \rangle \leq \beta, \langle H, \mu \rangle < \infty\}$$

und den Zustandsraum

$$E_\beta^N = E^N \cap \mathcal{M}_\beta(H) .$$

Nach Lemma 2.1 erfüllen λ_0 , λ_1 und λ_2 , gegeben durch (2.6), die Bedingung (1.33). Weiterhin folgt Bedingung (1.52) aus

$$\lambda_1(x, \Xi) = f(x), \quad \lambda_2(x, y, \Xi) = K(x, y)$$

und den Voraussetzungen (2.25) bzw. (2.27) und $\alpha < 1/2(r - \epsilon + 1) < r - \epsilon$. Für $N \geq 1$ definieren wir den kompakt-beschränkten Kern λ^N gemäß Lemma A.8. Da wir $E \equiv S \equiv 0$ voraussetzen, bleibt die Gesamtmasse bei jedem Koagulations- und Fragmentationsereignis erhalten, insbesondere gilt (1.56), und für $\mu \in E_\beta^N$ folgt (siehe (2.11) oder (2.15))

$$\begin{aligned} &\int_{E_\beta^N} [\langle H, \mu_2 \rangle - \langle H, \mu \rangle] \lambda^N(\mu, d\mu_2) \\ &= \frac{1}{2N^2} \sum_{1 \leq i \neq j \leq n} [H(x_i + x_j) - H(x_i) - H(x_j)] K(x_i, x_j) \\ &\quad + \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^n \sum_{y=1}^{x_i-1} [H(x_i - y) + H(y) - H(x_i)] F(x_i - y, y) . \end{aligned} \quad (2.29)$$

(1) Unter der Voraussetzung (2.25) des Theorems 2.5 erhalten wir aus (2.29) und Lemma 2.7 für jedes $\mu \in E_\beta^N$

$$\begin{aligned} &\int_{E_\beta^N} [\langle H, \mu_2 \rangle - \langle H, \mu \rangle] \lambda^N(\mu, d\mu_2) \\ &\leq \frac{c}{2} \int_{\mathcal{Z}} \int_{\mathcal{Z}} [(x+y)^r - x^r - y^r] [x+y] \mu(dx) \mu(dy) \\ &\leq 2c r! \beta \langle H, \mu \rangle . \end{aligned} \quad (2.30)$$

(2) Unter Verwendung der Symmetrie (2.3) von F und Voraussetzung (2.28) des Theorems 2.6 gilt für $x \geq 3$

$$\sum_{y=1}^{x-1} [(x-y)^r + y^r - x^r] F(x-y, y)$$

$$\begin{aligned}
&\leq -2 \sum_{y=1}^{\lfloor \frac{x-1}{2} \rfloor} [(x-y+y)^r - (x-y)^r - y^r] F(x-y, y) \\
&= -2 \sum_{y=1}^{\lfloor \frac{x-1}{2} \rfloor} \left(\sum_{s=1}^{r-1} \frac{r!}{s!(r-s)!} (x-y)^s y^{1-s} y^{r-1} \right) F(x-y, y) \\
&\leq -x \sum_{y=1}^{\lfloor \frac{x-1}{2} \rfloor} y^{r-1} F(x-y, y) \\
&\leq -c_{r-1} x^{\gamma+r}
\end{aligned} \tag{2.31}$$

und aus (2.29), (2.27), (2.31) und Lemma 2.7 folgt für $\mu \in E_\beta^N$

$$\begin{aligned}
&\int_{E_\beta^N} [\langle H, \mu_2 \rangle - \langle H, \mu \rangle] \lambda^N(\mu, d\mu_2) \\
&\leq \frac{c}{2} \int_{\mathcal{Z}} \int_{\mathcal{Z}} [(x+y)^r - x^r - y^r] x^\alpha y^\alpha \mu(dx) \mu(dy) - \frac{c_{r-1}}{2N} \sum_{x_i \geq 3} x_i^{\gamma+r} \\
&\leq c r r! \beta \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n x_i^{2\alpha+r-1} - \frac{c_{r-1}}{2N} \sum_{x_i \geq 3} x_i^{\gamma+r}.
\end{aligned}$$

Da $\gamma > 2\alpha - 1$ vorausgesetzt wird, gibt es ein $x_0 \geq 3$, so dass

$$\int_{E_\beta^N} [\langle H, \mu_2 \rangle - \langle H, \mu \rangle] \lambda^N(\mu, d\mu_2) \leq c r r! \beta^2 \max_{1 \leq x \leq x_0} x^{2\alpha+r-1}. \tag{2.32}$$

Wir wählen $\nu_0^N \in \mathcal{P}(E_\beta^N)$ gemäß Lemma 1.26. Nach (2.30) bzw. (2.32) ist Bedingung (1.38) auf E_β^N gleichmäßig in N erfüllt. Damit sind unter Berücksichtigung von Bemerkung 1.22 sämtliche Voraussetzungen des Korollars 1.18 und des Theorems 1.20 gegeben. Sei X^N mittels (1.14) und dem minimalen Sprungprozeß bzgl. λ^N und ν_0^N definiert. Aus $E \equiv S \equiv 0$ folgt für $t \geq 0$ die fast sichere Masseerhaltung

$$\langle \varphi, X^N(t) \rangle = \langle \varphi, X^N(0) \rangle. \tag{2.33}$$

Nach Theorem 1.20 existiert eine Teilfolge X^{N_k} , die in Verteilung gegen X konvergiert. Damit gibt es eine dichte Menge $\{t_n\}_{n=1}^\infty \subset [0, \infty)$, so dass $X^{N_k}(t_n) \Rightarrow X(t_n)$ für jedes n . Aus $\varphi = O(h)$ und Lemma 1.25(2) erhalten wir

$$\langle \varphi, X^{N_k}(t_n) \rangle \Rightarrow \langle \varphi, X(t_n) \rangle, \quad n \geq 1. \tag{2.34}$$

Die Konvergenz $\nu_0^N \Rightarrow \mu_0$, (2.33), (2.34) und die Stetigkeit (nach (1.50)) von X liefern schließlich fast sicher

$$\langle \varphi, X(t) \rangle = \langle \varphi, \mu_0 \rangle, \quad t \geq 0.$$

Da X nach Theorem 1.20 und Lemma 2.1 fast sicher die K-F-Gleichung löst, folgt unmittelbar die Existenz einer masseerhaltenden Lösung $\mu \in C([0, \infty), \mathcal{M}(H, h))$ zur Anfangsbedingung μ_0 . \square

2.3 Mass-Flow-Prozeß

Sei wieder $\mathcal{Z} = \mathbb{N}$ oder $\mathcal{Z} = (0, \infty)$ und K ein nichtnegativer, symmetrischer und stetiger Koagulationskern. Die Lösung der Koagulationsgleichung (2.17), die wir vorläufig mit $\nu(t)$ bezeichnen wollen, repräsentiert den zeitlichen Verlauf der Clusterkonzentration. Die Masse aller Cluster der Größe $x \in \mathcal{Z}$ ist durch

$$\mu(t, dx) = x \nu(t, dx), \quad t \geq 0, \quad (2.35)$$

gegeben und tritt - wie aus Lemma 2.8 hervorgeht - als Lösung der Gleichung

$$\langle \varphi, \mu(t) \rangle = \langle \varphi, \mu_0 \rangle + \int_0^t Q(\varphi, \mu(s)) ds, \quad t \geq 0, \varphi \in C_c(\mathcal{Z}), \quad (2.36)$$

in Erscheinung. Hierbei ist

$$Q(\varphi, \mu) = \int_{\mathcal{Z}} \int_{\mathcal{Z}} [\varphi(x+y) - \varphi(x)] \frac{K(x, y)}{y} \mu(dx) \mu(dy) \quad (2.37)$$

und $\mu \in C([0, \infty), \mathcal{M}(\mathcal{Z}))$ heißt Lösung zur Anfangsbedingung $\mu_0 \in \mathcal{M}(\mathcal{Z})$, falls für jedes $t \geq 0$ und $\varphi \in C_c(\mathcal{Z})$ das Integral $Q(\varphi, \mu(t))$ existiert, falls $Q(\varphi, \mu(\cdot))$ integrierbar auf $[0, t]$ ist und falls μ die Gleichung (2.36) erfüllt. Da die Gleichung den zeitlichen Verlauf der Clustermasse beschreibt, nennen wir sie im folgenden Mass-Flow-Gleichung.

Lemma 2.8 *Seien μ und ν maßwertige Abbildungen, die (2.35) genügen. Dann löst μ die Mass-Flow-Gleichung (2.36)-(2.37) genau dann, wenn ν die Koagulationsgleichung (2.17) löst.*

Beweis. Es gilt $\mu \in C([0, \infty), \mathcal{M}(\mathcal{Z}))$ genau dann, wenn $\nu \in C([0, \infty), \mathcal{M}(\mathcal{Z}))$. Sei $g(x) = x$, $x \in \mathcal{Z}$, und $\varphi \in C_c(\mathcal{Z})$. Unter Verwendung von $\langle \varphi, \mu(t) \rangle = \langle \varphi g, \nu(t) \rangle$ und der Symmetrie von K erhalten wir

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \int_{\mathcal{Z}} \int_{\mathcal{Z}} [\varphi(x+y)(x+y) - \varphi(x)x - \varphi(y)y] K(x, y) \nu(s, dx) \nu(s, dy) \\ &= \int_{\mathcal{Z}} \int_{\mathcal{Z}} [\varphi(x+y)x - \varphi(x)x] \frac{K(x, y)}{xy} \mu(s, dx) \mu(s, dy) \\ &= \int_{\mathcal{Z}} \int_{\mathcal{Z}} [\varphi(x+y) - \varphi(x)] \frac{K(x, y)}{y} \mu(s, dx) \mu(s, dy) \end{aligned}$$

und somit die gewünschte Äquivalenz. \square

Die Mass-Flow-Gleichung geht auf die Arbeit [5] zurück, in der ein zeitdiskreter stochastischer Algorithmus zur numerischen Approximation der Lösung der Koagulationsgleichung vorgeschlagen wird. Hier wollen wir die Gleichung in ähnlicher Weise stochastisch interpretieren, wie es bei der Koagulationsgleichung und dem Marcus-Lushnikov-Prozeß der Fall ist. Die Grundidee, dass einzelne Partikel nicht vollständige Cluster wie beim Marcus-Lushnikov-Prozeß repräsentieren sondern geeignete Fragmente, läßt sich im diskreten Fall besonders leicht nachvollziehen: Entsprechend der Transformation (2.35) wird

jeder x -Cluster in x verschiedene Partikel aufgelöst. Man denke dabei an ungebundene Monomere, die nur vorübergehend dem x -Cluster zugeordnet sind und dessen Zustand x annehmen. Der Term (2.37) besagt, dass solch ein Partikel nach Wechselwirkung mit einem Partikel im Zustand y den neuen Zustand $x + y$ annimmt und dass die Rate dieses Übergangs proportional zu $\frac{K(x,y)}{y}$ ist. Diese Überlegungen führen zu einem kanonischen Teilchensystem, dass wir nun im Detail vorstellen werden.

Sei $\beta > 0$, $0 < b_N \leq \infty$ und

$$k \in C(\mathcal{Z}), \text{ so dass } k > 0 \text{ und } \frac{k(x)}{x} \text{ monoton fallend ist.} \quad (2.38)$$

Der Zustandsraum

$$E_\beta^N = \left\{ \mu = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n \delta_{x_i} : x_i \in \mathcal{Z} \cap (0, b_N], \int_{\mathcal{Z}} \frac{k(x)}{x} \mu(dx) \leq \beta \right\} \quad (2.39)$$

mit der schwachen Topologie ist metrisch, separabel und lokal-kompakt. Dies ergibt sich unmittelbar aus Lemma 1.17 und Lemma 1.25(1). Da der stetige Koagulationskern K beschränkt auf kompakten Mengen ist, läßt sich analog dem Beweis von Lemma A.8 die Existenz eines kompakt-beschränkten Kerns λ^N auf E_β^N zeigen mit der Eigenschaft

$$\int_{E_\beta^N} [\Psi(\mu_2) - \Psi(\mu)] \lambda^N(\mu, d\mu_2) = \frac{1}{N} \sum_{1 \leq i \neq j \leq n} \left[\Psi(J(\mu, x_i, x_j)) - \Psi(\mu) \right] \frac{K(x_i, x_j)}{x_j} \quad (2.40)$$

für jedes $\mu \in E_\beta^N$ und $\Psi \in C_b(E_\beta^N)$. Hierbei gilt für den Folgezustand

$$J(\mu, x_i, x_j) = \begin{cases} \mu - \frac{1}{N} \delta_{x_i} + \frac{1}{N} \delta_{x_i+x_j} & : x_i + x_j \leq b_N \\ \mu - \frac{1}{N} \delta_{x_i} & : x_i + x_j > b_N \end{cases} \quad (2.41)$$

nach Bedingung (2.38)

$$J(\mu, x_i, x_j) \in E_\beta^N, \quad 1 \leq i \neq j \leq n,$$

so dass die rechte Seite von (2.40) tatsächlich wohldefiniert ist. \mathcal{A}^N bezeichne wieder den zu λ^N gehörigen Operator (1.11) und $\mathcal{D}(\mathcal{A}^N)$ seinen Definitionsbereich. Den minimalen Sprungprozeß bzgl. λ^N und $\nu_0^N \in \mathcal{P}(E_\beta^N)$ nennen wir Mass-Flow-Prozeß.

Im Fall des unbeschränkten Typenraums \mathcal{Z} , d.h., falls $b_N = \infty$, können einzelne Partikel beliebig wachsen und es stellt sich die Frage nach der Regularität des Mass-Flow-Prozesses. Zunächst werden wir die Regularität für sublineare Koagulationskerne zeigen, beschränken uns jedoch auf den diskreten Fall, der sich mühelos in das allgemeine stochastische Modell aus Abschnitt 1.3 einfügt. Dieser Fall führt zu einer konstanten Teilchenzahl und wird in den Arbeiten [19] und [20] aufgegriffen. Die Autoren untersuchen u.a. das stochastische Verhalten eines fixierten Teilchens und charakterisieren diesen Prozeß im Limes $N \rightarrow \infty$ als Lösung eines geeigneten nichtlinearen Martingalproblems.

Für gelierende Kerne ist zu vermuten, dass der Masseverlust mit der Explosion einzelner Partikel korrespondiert. In diesem Fall ermöglicht die Beschränkung des Typenraums durch einen maximalen Zustand $b_N < \infty$ und das Verwerfen von Teilchen, die einen

größeren Zustand annehmen (siehe (2.41)), sowohl die theoretische als auch numerische Behandlung des Teilchensystems. Für $b_N \rightarrow \infty$ läßt sich die Konvergenz des Mass-Flow-Prozesses unter Verwendung der vagen Topologie zeigen. Dazu ist ein Rückgriff auf die in Abschnitt 1.4 zur Verfügung gestellten Resultate aber nur bedingt möglich, so dass zusätzliche Anstrengungen erforderlich sind. Wir folgen dabei dem Beweis in [28].

2.3.1 Unbeschränkter Typenraum

Mit der Wahl $k(x) = x$ und $b_N = \infty$ ergibt sich aus (2.39) der Zustandsraum

$$E_\beta^N = \left\{ \mu = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n \delta_{x_i} : x_i \in \mathcal{Z}, \mu(\mathcal{Z}) \leq \beta \right\}$$

mit unbeschränktem Typenraum \mathcal{Z} . Sei $\mathcal{Z} = \mathbb{N}$, $r \geq 2$ eine natürliche Zahl, $H(x) = x^r$ und $h(x) = x^{r-1}$.

$$\mathcal{M}_\beta(H) = \{ \mu \in \mathcal{M}(\mathcal{Z}) : \mu(\mathcal{Z}) \leq \beta, \langle H, \mu \rangle < \infty \}$$

und der Zustandsraum E_β^N stimmen mit den Räumen aus Bemerkung 1.22 für die Funktion $\varphi \equiv 1$ überein. (E_β^N, d_1) läßt sich stetig in den Raum $(\mathcal{M}_\beta(H), d_h)$ einbetten (siehe (1.48)) und der mittels dem Mass-Flow-Prozeß und (1.14) definierte Prozeß X^N kann als $D([0, \infty), (\mathcal{M}_\beta(H), d_h))$ -wertige Zufallsvariable angesehen werden. Das folgende Theorem beinhaltet die wesentlichen Approximationseigenschaften des Mass-Flow-Prozesses im diskreten Fall für sublineare Koagulationskerne. Die Konvergenz der Mass-Flow-Prozesse folgt dabei wieder zumindest für $K(x, y) \leq c x^{1/2} y^{1/2}$ aus dem Eindeutigkeitsresultat in [8].

Theorem 2.9 *Sei $\mathcal{Z} = \mathbb{N}$, $k(x) = x$ und $b_N = \infty$. Sei $r \geq 2$ eine natürliche Zahl, $H(x) = x^r$ und $h(x) = x^{r-1}$. Es gelte*

$$K(x, y) \leq c(x + y), \quad x, y \in \mathbb{N}, \quad (2.42)$$

für eine Konstante $c > 0$ und $\nu_0^N \in \mathcal{P}(E_\beta^N)$ erfülle die Bedingungen

$$\sup_N \int_{E_\beta^N} \langle H, \mu \rangle d\nu_0^N(d\mu) < \infty \quad \text{und} \quad \nu_0^N \Rightarrow \mu_0 \in \mathcal{M}_\beta(H). \quad (2.43)$$

Dann ist der Mass-Flow-Prozeß für jedes $N \geq 1$ regulär. Die Folge X^N ist relativ kompakt und jeder schwache Limes löst fast sicher die Mass-Flow-Gleichung (2.36)-(2.37) zur Anfangsbedingung μ_0 .

Beweis. Wir fügen zunächst den Mass-Flow-Prozeß in das stochastische Modell aus Abschnitt 1.3 ein. Sei Ξ durch (1.32) gegeben. Wir setzen $\lambda_0(B)$ und $\lambda_1(x, B)$ gleich Null für $x \in \mathbb{N}$ und $B \in \mathcal{B}(\Xi)$. Für den durch

$$\lambda_2(x, y, B) = 1_B(\delta_{x+y} + \delta_y) \frac{2K(x, y)}{y}, \quad x, y \in \mathbb{N}, B \in \mathcal{B}(\Xi),$$

definierten kompakt-beschränkten Kern λ_2 von $\mathbb{N} \times \mathbb{N}$ nach Ξ und den Folgezustand (siehe (1.34))

$$J_2(\mu, x_i, x_j, \xi) = \mu + N^{-1} [\xi - \delta_{x_i} - \delta_{x_j}]$$

erhalten wir in Übereinstimmung mit der Darstellung (1.35)

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^N \Psi(\mu) &= \int_{E_\beta^N} [\Psi(\mu_2) - \Psi(\mu)] \lambda^N(\mu, d\mu_2) \\ &= \frac{1}{2N} \sum_{1 \leq i \neq j \leq n} \int_{\Xi} [\Psi(J_2(\mu, x_i, x_j, \xi)) - \Psi(\mu)] \lambda_2(x_i, x_j, d\xi), \end{aligned}$$

wobei $\mu \in E_\beta^N$ und $\Psi \in C_b(E_\beta^N)$. Wir können nun Korollar 1.18 und Theorem 1.20 in Zusammenhang mit Bemerkung 1.22 anwenden. Die Funktionen H und h erfüllen die Bedingungen des Korollars und des Theorems. Die Funktion $\eta(\mu) = \langle H, \mu \rangle$, $\mu \in E_\beta^N$, liegt im Definitionsbereich $\mathcal{D}(\mathcal{A}^N)$ und aus (2.42) und Lemma 2.7 folgt

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^N \eta(\mu) &= \frac{1}{N^2} \sum_{1 \leq i \neq j \leq n} [H(x_i + x_j) - H(x_i)] \frac{K(x_i, x_j)}{x_j} \\ &\leq \int_{\mathcal{Z}} \int_{\mathcal{Z}} [H(x + y) - H(x)] \frac{K(x, y)}{y} \mu(dx) \mu(dy) \\ &\leq \frac{c}{2} \int_{\mathcal{Z}} \int_{\mathcal{Z}} [(x + y)^{r+1} - x^{r+1} - y^{r+1}] [x + y] \frac{1}{xy} \mu(dx) \mu(dy) \\ &\leq 2c(r+1)(r+1)! \beta \eta(\mu). \end{aligned} \tag{2.44}$$

Nach (2.44) und Voraussetzung (2.43) ist Bedingung (1.38) auf E_β^N gleichmäßig in N erfüllt, so dass die Regularität des Mass-Flow-Prozesses aus Korollar 1.18 und Bemerkung 1.22 folgt. Bedingung (1.53) ist ebenfalls nach Voraussetzung erfüllt und die Stetigkeit der Funktionen (1.54) ist im diskreten Fall trivial. Aus $r \geq 2$ und (2.42) ergibt sich

$$\lambda_2(x, y, \Xi) \leq 2ch(x)h(y),$$

so dass sämtliche Bedingungen des Theorems 1.20 gegeben sind und der Rest der Behauptung aus Theorem 1.20, Bemerkung 1.22 und Lemma 2.8 folgt. \square

2.3.2 Beschränkter Typenraum

Wir setzen (2.38) und $b_N < \infty$ voraus und betrachten den Zustandsraum E_β^N aus (2.39) mit beschränktem Typenraum $\mathcal{Z} \cap (0, b_N]$. Die Sublinearität des Koagulationskerns aus dem vorangegangenen Abschnitt geben wir zugunsten der Bedingung

$$K(x, y) \leq k(x)k(y), \quad x, y \in \mathcal{Z}, \tag{2.45}$$

auf, die gelierende Kerne einbezieht. Aus

$$\lambda^N(\mu, E_\beta^N) \leq N \int_{\mathcal{Z}} \int_{\mathcal{Z}} \frac{K(x, y)}{y} \mu(dx) \mu(dy) \leq N b_N \beta^2, \quad \mu \in E_\beta^N,$$

folgt die Beschränktheit des Kerns λ^N und somit unmittelbar die Regularität des Mass-Flow-Prozesses. Der Raum (E_β^N, d_1) läßt sich in den mit der vagen Topologie versehenen Raum (siehe (1.55))

$$\mathcal{M}_\beta(0) = \left\{ \mu \in \mathcal{M}(\mathcal{Z}) : \int_{\mathcal{Z}} \frac{k(x)}{x} \mu(dx) \leq \beta \right\}$$

stetig einbetten, so dass der mittels dem Mass-Flow-Prozeß und (1.14) definierte Prozeß X^N eine $D([0, \infty), (\mathcal{M}_\beta(0), d_0))$ -wertige Zufallsvariable ist. Im nächsten Theorem geben wir das Approximationsverhalten des Mass-Flow-Prozesses unter der Bedingung (2.45) für den diskreten und kontinuierlichen Fall wieder.

Theorem 2.10 *Sei $\mathcal{Z} = \mathbb{N}$ oder $\mathcal{Z} = (0, \infty)$, $0 < b_N < \infty$ und $\nu_0^N \in \mathcal{P}(E_\beta^N)$. Es gelte (2.38). Der Koagulationskern K sei stetig und genüge der Ungleichung (2.45).*

(1) *Dann ist die Folge X^N relativ kompakt.*

(2) *Darüber hinaus gelte $b_N \rightarrow \infty$,*

$$\lim_{x+y \rightarrow \infty} \frac{K(x, y)}{k(x)k(y)} = 0 \quad (2.46)$$

und

$$\nu_0^N \Rightarrow \mu_0 \in \mathcal{M}_\beta(0) . \quad (2.47)$$

Dann löst jeder schwache Limes der Folge X^N fast sicher die Mass-Flow-Gleichung (2.36)-(2.37) zur Anfangsbedingung μ_0 .

Zum Beweis von Theorem 2.10 führen wir folgende Notation ein. Für $\varphi \in C_c(\mathcal{Z})$ definieren wir

$$B(\varphi) = \sup \{x \in \mathcal{Z} : \varphi(x) \neq 0\} \quad (2.48)$$

und die Funktion $\Phi \in C_b(E_\beta^N)$ durch

$$\Phi(\mu) = \langle \varphi, \mu \rangle, \quad \mu \in E_\beta^N .$$

Die Beschränktheit von Φ folgt dabei aus

$$\sup_{\mu \in E_\beta^N} \mu(\mathcal{Z}) \leq \beta \left[\inf_{x \in \mathcal{Z} \cap (0, b_N]} \frac{k(x)}{x} \right]^{-1}$$

und der Annahme (2.38). Weiterhin sei

$$Q^N(\varphi, \mu) := \mathcal{A}^N \Phi(\mu) = \frac{1}{N^2} \sum_{1 \leq i \neq j \leq n} [\varphi(x_i + x_j) 1_{(0, b_N]}(x_i + x_j) - \varphi(x_i)] \frac{K(x_i, x_j)}{x_j} \quad (2.49)$$

und analog zu (1.73)

$$M_\varphi^N(t) = \langle \varphi, X^N(t) \rangle - \langle \varphi, X^N(0) \rangle - \int_0^t Q^N(\varphi, X^N(s)) ds .$$

Aus der Beschränktheit der Funktion Φ und des Kerns λ^N folgt natürlich direkt, dass M_φ^N ein $\{\mathcal{F}_t^{X^N}\}$ -Martingal ist.

Lemma 2.11 *Es gelte (2.38) und (2.45). Dann folgt für $\varphi \in C_c(\mathcal{Z})$*

$$\sup_N \sup_{\mu \in E_\beta^N} |Q^N(\varphi, \mu)| < \infty \quad (2.50)$$

und

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \mathbb{E} \sup_{s \leq t} |M_\varphi^N(s)| = 0, \quad t \geq 0. \quad (2.51)$$

Beweis. Aus (2.49) und (2.45) erhalten wir für $\mu \in E_\beta^N$

$$|Q^N(\varphi, \mu)| \leq \beta^2 \sup_{x, y \in \mathcal{Z}} |\varphi(x+y) 1_{(0, b_N]}(x+y) - \varphi(x)| x \leq 2\beta^2 \|\varphi\| B(\varphi)$$

und somit (2.50). Aus $\Phi^2 \in C_b(E_\beta^N)$ folgt

$$\begin{aligned} \mathbb{E} [M_\varphi^N(t)]^2 &= \mathbb{E} \int_0^t [\mathcal{A}^N \Phi^2 - 2\Phi \mathcal{A}^N \Phi] (X^N(s)) ds \\ &\leq N \mathbb{E} \int_0^t \int_{\mathcal{Z}} \int_{\mathcal{Z}} \left[\langle \varphi, J(X^N(s), x, y) \rangle - \langle \varphi, X^N(s) \rangle \right]^2 \frac{K(x, y)}{y} X^N(s, dx) X^N(s, dy) ds \\ &\leq \frac{1}{N} \mathbb{E} \int_0^t \int_{\mathcal{Z}} \int_{\mathcal{Z}} [(\varphi(x+y) - \varphi(x))^2 + \varphi(x)^2] \frac{K(x, y)}{y} X^N(s, dx) X^N(s, dy) ds \\ &\leq \frac{5\beta^2 B(\varphi) \|\varphi\|^2 t}{N}. \end{aligned} \quad (2.52)$$

Doob's Ungleichung führt zu

$$\left(\mathbb{E} \sup_{s \leq t} |M_\varphi^N(s)| \right)^2 \leq 4 \mathbb{E} [M_\varphi^N(t)]^2$$

und aus (2.52) ergibt sich (2.51). \square

Lemma 2.12 *Es gelte (2.38). K sei stetig und genüge den Bedingungen (2.45) und (2.46).*

(1) *Dann ist für jedes $\varphi \in C_c(\mathcal{Z})$ die Abbildung*

$$M_\varphi : D([0, \infty), (\mathcal{M}_\beta(0), d_0)) \rightarrow D([0, \infty), \mathbb{R}), \quad (2.53)$$

definiert durch (2.37) und

$$M_\varphi(\mu, t) = \langle \varphi, \mu(t) \rangle - \langle \varphi, \mu(0) \rangle - \int_0^t Q(\varphi, \mu(s)) ds, \quad (2.54)$$

stetig bzgl. der Skorohod-Topologie.

(2) *Sei $\{\varphi_k\}_{k=1}^\infty$ durch (1.58) gegeben und $\mu \in D([0, \infty), (\mathcal{M}_\beta(0), d_0))$, so dass $M_{\varphi_k}(\mu) \equiv 0$, $k \geq 1$. Dann gilt $M_\varphi(\mu) \equiv 0$ für jedes $\varphi \in C_c(\mathcal{Z})$.*

Beweis. (1) Zu gegebenem $\delta > 0$ läßt sich der Koagulationskern in der Form $K = K_1 + K_2$ darstellen, wobei $K_1 \in C_c(\mathcal{Z} \times \mathcal{Z})$ und $0 \leq K_2 \leq K$ den Träger

$$\left\{ (x, y) : x \leq \delta \right\} \cup \left\{ (x, y) : y \leq \delta \right\} \cup \left\{ (x, y) : x + y \geq \delta^{-1} \right\}$$

besitze. Wir definieren die Funktionen

$$f_i(x, y) = [\varphi(x + y) - \varphi(x)] \frac{K_i(x, y)}{y}, \quad i = 1, 2.$$

Für jedes $\mu \in \mathcal{M}_\beta(0)$ erhalten wir

$$\int \int_{x \leq \delta} |f_2(x, y)| \mu(dx) \mu(dy) \leq 2 \|\varphi\| \delta \beta^2,$$

$$\int \int_{y \leq \delta} |f_2(x, y)| \mu(dx) \mu(dy) \leq B(\varphi) \sup_{|x-y| \leq \delta} |\varphi(x) - \varphi(y)| \beta^2,$$

und

$$\int \int_{x+y \geq \delta^{-1}} |f_2(x, y)| \mu(dx) \mu(dy) \leq 2 \|\varphi\| B(\varphi) \sup_{x+y \geq \delta^{-1}} \frac{K(x, y)}{k(x) k(y)} \beta^2.$$

Unter Berücksichtigung der Annahme (2.46) gibt es somit zu jedem $\epsilon > 0$ ein $\delta > 0$ mit der Eigenschaft

$$\int \int_{\mathcal{Z}} |f_2(x, y)| \mu(dx) \mu(dy) \leq \epsilon, \quad \mu \in \mathcal{M}_\beta(0). \quad (2.55)$$

Die Folge μ_n konvergiere vag in $\mathcal{M}_\beta(0)$ gegen μ . Dann konvergiert $\mu_n \times \mu_n$ vag gegen $\mu \times \mu$ und

$$\int \int_{\mathcal{Z}} f_1(x, y) \mu_n(dx) \mu_n(dy) \rightarrow \int \int_{\mathcal{Z}} f_1(x, y) \mu(dx) \mu(dy). \quad (2.56)$$

Aus (2.55) und (2.56) erhalten wir $Q(\varphi, \cdot) \in C((\mathcal{M}_\beta(0), d_0))$ für jedes $\varphi \in C_c(\mathcal{Z})$ und nach Lemma A.3 die Stetigkeit der Abbildung (2.53).

(2) Gemäß der Wahl der Folge φ_k existieren zu $\varphi \in C_c(\mathcal{Z})$ ein $m > 1$ und eine Teilfolge φ_{k_n} derart, dass

$$\|\varphi - \varphi_{k_n}\| \rightarrow 0 \quad \text{und} \quad \{x : \varphi_{k_n}(x) \neq 0\} \subset [1/m, m]. \quad (2.57)$$

Wir verzichten im folgenden auf den Subindex n . Der Satz von der dominierten Konvergenz ergibt

$$\langle \varphi_k, \mu(t) \rangle \rightarrow \langle \varphi, \mu(t) \rangle, \quad t \geq 0. \quad (2.58)$$

Aufgrund der Konvergenz

$$g_k(x, y) = [\varphi_k(x + y) - \varphi_k(x)] \frac{K(x, y)}{y} \rightarrow [\varphi(x + y) - \varphi(x)] \frac{K(x, y)}{y} = g(x, y)$$

und der integrierbaren Majorante

$$|g_k(x, y)| \leq 2m \sup_k \|\varphi_k\| \frac{k(x)}{x} \frac{k(y)}{y} \quad (2.59)$$

läßt sich der Satz von der dominierten Konvergenz ein weiteres Mal anwenden und es folgt

$$\int_{\mathcal{Z}} \int_{\mathcal{Z}} g_k(x, y) \mu(s, dx) \mu(s, dy) \rightarrow \int_{\mathcal{Z}} \int_{\mathcal{Z}} g(x, y) \mu(s, dx) \mu(s, dy), \quad s \geq 0. \quad (2.60)$$

Darüberhinaus erhalten wir aus (2.59)

$$\sup_k \sup_{s \leq t} \int_{\mathcal{Z}} \int_{\mathcal{Z}} g_k(x, y) \mu(s, dx) \mu(s, dy) \leq 2m \sup_k \|\varphi_k\| \beta^2$$

und aus (2.58) und (2.60) schließlich

$$\begin{aligned} \langle \varphi, \mu(t) \rangle &= \lim_k \langle \varphi_k, \mu(t) \rangle = \lim_k \left[\langle \varphi_k, \mu(0) \rangle + \int_0^t \int_{\mathcal{Z}} \int_{\mathcal{Z}} g_k(x, y) \mu(s, dx) \mu(s, dy) ds \right] \\ &= \langle \varphi, \mu(0) \rangle + \int_0^t \int_{\mathcal{Z}} \int_{\mathcal{Z}} g(x, y) \mu(s, dx) \mu(s, dy) ds. \end{aligned}$$

□

Beweis des Theorems 2.10. (1) Zunächst zeigen wir die relative Kompaktheit der Folge X^N mittels Theorem 1.28, wobei wir $h = 0$, $H(x) = \frac{k(x)}{x}$ und $E = \mathcal{M}_\beta(0)$ wählen. Nach [9, Theorem 31.2] ist $(\mathcal{M}_\beta(0), d_0)$ relativ kompakt und nach Lemma 1.25(1) kompakt. Folglich ist Bedingung (1.64) erfüllt. Sei $\varphi \in C_c(\mathcal{Z})$ und $\epsilon, T > 0$. Gemäß Lemma 2.11 gilt für genügend kleines $\Delta t > 0$ und genügend großes N

$$\begin{aligned} &P \left(\sup_{|s-t| \leq \Delta t, t \leq T} |\langle \varphi, X^N(s) \rangle - \langle \varphi, X^N(t) \rangle| \geq \epsilon \right) \\ &\leq P \left(\sup_{|s-t| \leq \Delta t, t \leq T} \left| M_\varphi^N(s) - M_\varphi^N(t) + \int_t^s Q^N(\varphi, X^N(u)) du \right| \geq \epsilon \right) \\ &\leq \frac{4}{\epsilon} \mathbb{E} \sup_{s \leq T + \Delta t} |M_\varphi^N(s)| \\ &\leq \epsilon \end{aligned}$$

und somit Bedingung (1.65). Die Folge X^N ist also relativ kompakt und jeder schwache Limes X ist nach (1.66) fast sicher stetig.

(2) Sei $\varphi \in C_c(\mathcal{Z})$, $B(\varphi)$ durch (2.48) gegeben und

$$b(\varphi) = \inf \{x \in \mathcal{Z} : \varphi(x) \neq 0\} > 0.$$

Da b_N nach Voraussetzung gegen ∞ konvergiert, gilt $b_N > B(\varphi)$ für genügend großes N und für $\mu \in E_\beta^N$

$$\begin{aligned} |Q^N(\varphi, \mu) - Q(\varphi, \mu)| &= \left| \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^n [\varphi(2x_i) - \varphi(x_i)] \frac{K(x_i, x_i)}{x_i} \right| \\ &\leq \frac{2 \|\varphi\| \beta}{N} \sup \{k(x) : b(\varphi)/2 \leq x \leq B(\varphi)\}. \quad (2.61) \end{aligned}$$

Aus

$$\mathbb{E} \sup_{s \leq t} |M_\varphi(X^N, s)| = \mathbb{E} \sup_{s \leq t} \left| M_\varphi^N(s) + \int_0^s [Q^N(\varphi, X^N(u)) - Q(\varphi, X^N(u))] du \right| ,$$

Lemma 2.11 und (2.61) folgt

$$\sup_{s \leq t} |M_\varphi(X^N, s)| \Rightarrow 0, \quad t \geq 0 .$$

Angenommen die Teilfolge X^{N_n} konvergiere in Verteilung gegen X . Dann ergibt sich aus Lemma 2.12(1) f.s.

$$M_\varphi(X) \equiv 0$$

und aus Lemma 2.12(2) f.s.

$$M_\varphi(X) \equiv 0, \quad \varphi \in C_c(\mathcal{Z}) .$$

Gemäß der Voraussetzung (2.47) gilt $X(0) = \mu_0$ fast sicher, womit X fast sicher die Mass-Flow-Gleichung (2.36)-(2.37) zur Anfangsbedingung μ_0 löst. \square

Kapitel 3

Numerische Analyse der Koagulationsgleichung

Die Koagulationsgleichung erlaubt nur für wenige spezielle Kerne eine exakte Lösung. Effiziente numerische Verfahren zu ihrer Approximation sind somit in praxisrelevanten Situationen aus der Aerosolwissenschaft und Polymerchemie erforderlich. Stochastische Partikelverfahren spielen dabei eine bedeutende Rolle. Eine Vielzahl stochastischer Algorithmen (z.B. [40], [41], [21], [87], [39], [46]) basiert auf dem Marcus-Lushnikov-Prozeß. Einige stochastische Algorithmen (z.B. [66], [58], [78], [77], [57]) stützen sich auf einen zusätzlichen Parameter, der die Zeitschrittweite beeinflusst, und liefern zeitdiskrete Näherungen der Koagulationsgleichung. Andere (z.B. [81], [5], [6]) lassen sich aus einer transformierten Gleichung oder einer Skalierung des Größenspektrums herleiten. Einen Überblick über Monte-Carlo-Methoden und weitere numerische Verfahren für die Koagulationsgleichung gibt die Arbeit [79].

Bei der Verwendung numerischer Algorithmen besteht grundsätzlich das Problem, den Approximationsfehler unter Berücksichtigung der Laufzeit möglichst gering zu halten. Die Güte stochastischer Algorithmen für nichtlineare Gleichungen hängt vom systematischen Fehler, also der Abweichung des Erwartungswertes von der exakten Lösung, und vom statistischen Fehler ab. Der statistische Fehler resultiert aus zufälligen Fluktuationen um den Erwartungswert herum und führt auf das Problem der Varianzreduktion bei der Approximation vorgegebener Funktionale (siehe z.B. [35, Kapitel 4]).

In diesem Kapitel untersuchen wir die numerischen Konvergenzeigenschaften des Koagulations- und Mass-Flow-Prozesses und die Einsatzfähigkeit abgeleiteter Partikelverfahren. Die Approximationsresultate aus dem letzten Kapitel bilden dabei die theoretische Grundlage zur Näherung von Funktionalen. Die Algorithmen und numerischen Ergebnisse, die wir hier präsentieren, liefern überwiegend eine neue Zusammenstellung der Arbeiten [27], [28] und [29]. Die wesentlichen Aspekte sollen kurz vorgestellt werden.

Der Mass-Flow-Prozeß zeichnet sich durch eine Umgewichtung des Größenspektrums und im Fall sublinearer Kerne durch eine konstante Teilchenzahl aus. Eine ausführliche Analyse ergibt, dass beide Faktoren zu einem kleineren systematischen Fehler und zur Varianzreduktion bei Funktionalen auf dem oberen Spektrum beitragen. Durch Einführung fiktiver Sprünge und regen Gebrauch der Acceptance-Rejection-Methode leiten wir neue

Algorithmen zur Realisierung der beiden Prozesse her. Zur Beurteilung ihrer Anwendbarkeit beziehen wir das Laufzeitverhalten ein und vergleichen ihre Effizienz miteinander. Die Varianz reduzierenden Eigenschaften des Mass-Flow-Prozesses schlagen sich dabei in stärkerem Maße nieder als seine gegenüber dem Koagulationsprozeß nachteilige Simulationszeit.

Im letzten Abschnitt kehren wir zu dem aus theoretischer Sicht wohl interessantesten und anspruchsvollsten Aspekt der Koagulationsmodelle, dem Gelationsphänomen, zurück und überprüfen die Algorithmen auf ihre Eignung zur Approximation der Gelmasse. Finite-Size-Effekte des Koagulationsprozesses führen zu einem erheblichen systematischen Fehler, während die in der Post-Gelationsphase abnehmende Teilchenzahl des Mass-Flow-Prozesses vermutlich dem Masseverlust entspricht. Wir geben Hypothesen über das asymptotische Verhalten des maximalen Clusters wieder und zeigen Grenzen bei ihrer numerischen Validierung auf.

3.1 Stochastische Algorithmen

Die Teilchensysteme können zur Approximation von Funktionalen der Form

$$I = I(\varphi, t) = \int_{\mathcal{Z}} \varphi(x) \mu(t, dx) \quad (3.1)$$

herangezogen werden. Hierbei sei $\mu \in C([0, \infty), \mathcal{M}(\mathcal{Z}))$ Lösung der Koagulationsgleichung und φ Element einer geeigneten Klasse von Funktionen. In diesem Abschnitt werden detailliert stochastische Algorithmen vorgestellt, mit denen Trajektorien des Koagulations- und Mass-Flow-Prozesses auf effiziente Weise erzeugt werden können. Es folgen Bemerkungen zu ihrer Implementierung und Anwendung.

3.1.1 Direct-Simulation-Algorithmus

Da die einzelnen Cluster konstantes Gewicht $\frac{1}{N}$ besitzen, läßt sich der Zustand des Koagulationsprozesses eindeutig durch das ungeordnete Tupel

$$(x_1(t), \dots, x_{n(t)}(t))$$

beschreiben. Hierbei bezeichne $x_i(t)$ die Größe des i -ten Teilchens und $n(t)$ die zufällige Teilchenzahl zur Zeit t . Funktionale der Form (3.1) können mithilfe der Zufallsvariablen

$$\xi^N = \xi^N(\varphi, t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{n(t)} \varphi(x_i(t)) \quad (3.2)$$

approximiert werden. Zur effizienten Realisierung des Koagulationsprozesses führen wir zunächst fiktive Sprünge ein.

Fiktive Sprünge

Dazu sei \hat{K} eine beliebige meßbare Funktion und majorisiere den Koagulationskern K , d.h.

$$K(x, y) \leq \hat{K}(x, y), \quad x, y \in \mathcal{Z}.$$

Der zum Koagulationsprozeß zugehörige Operator

$$\mathcal{A}^N \Psi(\mu) = \frac{1}{2N} \sum_{1 \leq i \neq j \leq n} [\Psi(J_K(\mu, x_i, x_j)) - \Psi(\mu)] K(x_i, x_j)$$

läßt sich in der Form

$$\mathcal{A}^N \Psi(\mu) = \int_{E^N} [\Psi(\mu_2) - \Psi(\mu)] \hat{\lambda}(\mu, d\mu_2)$$

darstellen, wobei

$$\hat{\lambda}(\mu, d\mu_2) = \frac{1}{2N} \sum_{1 \leq i \neq j \leq n} \left[K(x_i, x_j) \delta_{J_K(\mu, x_i, x_j)}(d\mu_2) + \left(\hat{K}(x_i, x_j) - K(x_i, x_j) \right) \delta_{\mu}(d\mu_2) \right]$$

und

$$J_K(\mu, x_i, x_j) = \mu + \frac{1}{N} [\delta_{x_i+x_j} - \delta_{x_i} - \delta_{x_j}].$$

Die Verteilung des Sprungprozesses bzgl. $\hat{\lambda}$ hängt selbstverständlich nicht von der Wahl der Majorante \hat{K} ab und stimmt mit der des Koagulationsprozesses überein. Die Konstruktion gemäß Abschnitt 1.2.1 liefert die folgende pfadweise Beschreibung bis zu einem vorgegebenen Zeitpunkt $T > 0$, die wir aufgrund der unmittelbaren 'physikalischen' Bedeutung der Cluster Direct-Simulation-Algorithmus (DSA) nennen wollen.

1. Erzeuge den Anfangszustand (x_1, \dots, x_n) und setze $t = 0$.

2. Warte eine exponentialverteilte Zeit τ mit Rate

$$\hat{\lambda} = \frac{1}{2N} \sum_{1 \leq i \neq j \leq n} \hat{K}(x_i, x_j) . \quad (3.3)$$

3. Wähle das Kollisionspaar i, j gemäß der Verteilung

$$\frac{\hat{K}(x_i, x_j)}{2N\hat{\lambda}} , \quad 1 \leq i \neq j \leq n . \quad (3.4)$$

4. Mit Wahrscheinlichkeit

$$\frac{K(x_i, x_j)}{\hat{K}(x_i, x_j)} \quad (3.5)$$

entferne x_i und x_j und füge $x_i + x_j$ hinzu.

5. Setze $t = t + \tau$ und gehe zu Schritt 2, falls $t < T$.

Der Einsatz der Majorante \hat{K} eröffnet die Möglichkeit, Trajektorien auf unterschiedliche Art und Weise zu realisieren. Das Inkriminieren der Zeit in Schritt 5 ohne vorausgegangenen Zustandswechsel wird dabei als fiktiver Sprung bezeichnet. Aus numerischer Sicht ist die Wahl der Majorante \hat{K} von herausragender Bedeutung, da sie das Laufzeitverhalten des stochastischen Algorithmus maßgeblich beeinflusst. Zur Verdeutlichung dienen die folgenden zwei Beispiele:

Beispiel 3.1 Die Wahl

$$\hat{K}(x, y) = K(x, y)$$

schließt fiktive Sprünge aus und führt zu der geringsten Anzahl an Sprüngen, die für die Realisierung des Prozesses notwendig ist. Andererseits ist die Berechnung der Sprungrate (3.3) und die Generierung der Verteilung (3.4) sehr zeitaufwendig, falls n groß ist und K eine komplexe Struktur besitzt.

Beispiel 3.2 Die (vom Gesamtzustand $\mu = N^{-1} \sum_{i=1}^n \delta_{x_i}$ abhängige) Maximummajorante

$$K_{\max}(\mu) = \max_{1 \leq i \neq j \leq n} K(x_i, x_j) \quad (3.6)$$

kann analog zu \hat{K} verwendet werden und führt zu Simulationseigenschaften, die denen aus Beispiel 3.1 entgegengesetzt sind. Die Sprungrate ist gegeben durch

$$\hat{\lambda} = K_{\max}(\mu) \frac{n(n-1)}{2N} \quad (3.7)$$

und Verteilung (3.4) entspricht der Gleichverteilung. Damit ist die Berechnung der Sprungrate und die Wahl eines Kollisionspaares äußerst einfach. Falls K unbeschränkt ist und sich die Cluster des Teilchensystems sehr stark in ihrer Größe unterscheiden, führt die Majorante (3.6) jedoch zu vielen fiktiven Sprüngen.

Produkt- und Summenmajorante

Beim Einsatz von Majoranten, die sich als Summe von Produkten darstellen lassen, kommen die positiven Simulationseigenschaften aus beiden Beispielen zum Tragen. Wir beginnen mit der reinen Produktmajorante

$$\hat{K}(x, y) = C x^{\epsilon_1} y^{\epsilon_2}, \quad C > 0, \quad \epsilon_1, \epsilon_2 \in \mathbb{R},$$

für die sich die Verteilung (3.4) unter Verwendung der Acceptance-Rejection-Methode (siehe z.B. [35, Abschnitt 3.6]) erzeugen läßt. Dazu wird dem Nullereignis $i = j$ eine Wahrscheinlichkeit proportional zu $x_i^{\epsilon_1 + \epsilon_2}$ zugeordnet, so dass die Generierung der Kollisionspartner i und j in Schritt 3 des obigen Algorithmus unabhängig voneinander erfolgen kann. Zur Vollständigkeit geben wir den gesamten resultierenden Algorithmus wieder:

1. Erzeuge den Anfangszustand (x_1, \dots, x_n) und setze $t = 0$.

2. Warte eine exponentialverteilte Zeit τ mit Rate

$$\hat{\lambda} = \frac{C}{2N} \left[\sum_{i=1}^n x_i^{\epsilon_1} \sum_{j=1}^n x_j^{\epsilon_2} - \sum_{i=1}^n x_i^{\epsilon_1 + \epsilon_2} \right].$$

3.1. Wähle das erste Kollisionsteilchen i gemäß der Verteilung

$$\frac{x_i^{\epsilon_1}}{\sum_{l=1}^n x_l^{\epsilon_1}}, \quad i = 1, \dots, n. \quad (3.8)$$

3.2. Wähle das zweite Kollisionsteilchen j gemäß der Verteilung

$$\frac{x_j^{\epsilon_2}}{\sum_{l=1}^n x_l^{\epsilon_2}}, \quad j = 1, \dots, n. \quad (3.9)$$

3.3. Falls $i = j$, gehe zu Schritt 3.1.

4. Mit Wahrscheinlichkeit

$$\frac{K(x_i, x_j)}{C x_i^{\epsilon_1} x_j^{\epsilon_2}}$$

entferne x_i und x_j und füge $x_i + x_j$ hinzu.

5. Setze $t = t + \tau$ und gehe zu Schritt 2, falls $t < T$.

Für Majoranten der Form

$$\hat{K}(x, y) = \hat{K}_1(x, y) + \dots + \hat{K}_L(x, y), \quad L \geq 2,$$

ist die Sprungrate (3.3) durch die Summe $\hat{\lambda} = \hat{\lambda}_1 + \dots + \hat{\lambda}_L$ gegeben, wobei

$$\hat{\lambda}_l = \frac{1}{2N} \sum_{1 \leq i \neq j \leq n} \hat{K}_l(x_i, x_j), \quad l = 1, \dots, L.$$

Die Verteilung (3.4) läßt sich in der Form

$$\sum_{l=1}^L \frac{\hat{\lambda}_l}{\hat{\lambda}} \frac{\hat{K}_l(x_i, x_j)}{2N \hat{\lambda}_l}, \quad 1 \leq i \neq j \leq n,$$

darstellen, welche die folgende Prozedur nahelegt:

3.1'. Wähle l gemäß den Wahrscheinlichkeiten

$$\frac{\hat{\lambda}_l}{\hat{\lambda}}, \quad l = 1, \dots, L.$$

3.2'. Wähle das Kollisionspaar i, j gemäß der Verteilung

$$\frac{\hat{K}_l(x_i, x_j)}{2N \hat{\lambda}_l}, \quad 1 \leq i \neq j \leq n.$$

Falls die Summanden \hat{K}_l Produktform besitzen, können die Teilschritte 3.1' - 3.2' und 3.1 - 3.3 in naheliegender Weise kombiniert werden.

Erzeugung der größenabhängigen Verteilung

Abschließend widmen wir uns der effizienten Erzeugung der Verteilungen (3.8) und (3.9). Dazu setzen wir $w_i = x_i^\epsilon$, $1 \leq i \leq n$. Der zufällige Index i sei gemäß den Wahrscheinlichkeitsgewichten

$$\frac{w_i}{\sum_{l=1}^n w_l}, \quad i = 1, \dots, n, \quad (3.10)$$

verteilt. Im Fall $\epsilon = 0$ entspricht (3.10) der Gleichverteilung, die natürlich direkt erzeugt werden kann. Falls $\epsilon \neq 0$ und n sehr groß ist, ist die Anwendung der Inverse-Transformation-Methode (siehe z.B. [35, Abschnitt 3.2.4]) zur Generierung des Indices i sehr zeitaufwendig. Wir schlagen deshalb eine Kombination mit der Acceptance-Rejection-Methode vor. Dazu wählen wir $S \in \mathbb{N}$ und

$$0 =: B_0 < B_1 < \dots < B_{S-1} < \max_{1 \leq i \leq n} w_i \leq B_S$$

und ordnen die Gewichte w_i den einzelnen Segmenten zu, d.h., wir wählen eine bijektive Abbildung

$$\iota : \{(s, k) : 1 \leq s \leq S, 1 \leq k \leq \alpha_s\} \rightarrow \{1, \dots, n\},$$

so dass

$$B_{s-1} < w_{s,k} \leq B_s, \quad s = 1, \dots, S, \quad k = 1, \dots, \alpha_s.$$

Hierbei sei α_s die Anzahl der Gewichte w_i im Segment $(B_{s-1}, B_s]$ und $w_{s,k} = w_{\iota(s,k)}$. Mit diesen Bezeichnungen läßt sich der Index i gemäß der folgenden Prozedur erzeugen:

a. Wähle Segment s gemäß der Verteilung

$$\frac{\sum_{k=1}^{\alpha_s} w_{s,k}}{\sum_{r=1}^S \sum_{k=1}^{\alpha_r} w_{r,k}}, \quad s = 1, \dots, S. \quad (3.11)$$

b. Wähle k gleichverteilt aus $\{1, \dots, \alpha_s\}$.

c. Mit Wahrscheinlichkeit

$$1 - \frac{w_{s,k}}{B_s} \quad (3.12)$$

wiederhole den Schritt b .

d. Setze $i = \iota(s, k)$.

Bemerkung 3.3 Bei der Wahl $\beta > 1$ und

$$B_s = \beta^{s-1}, \quad s = 1, 2, \dots, \quad (3.13)$$

ist die Wiederholungswahrscheinlichkeit (3.12) beschränkt durch $1 - \beta^{-1}$ für $s \geq 2$. Falls $\epsilon > 0$, gilt

$$\max_{1 \leq i \leq n} w_i \leq (N m_1)^\epsilon$$

wobei $m_1 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n x_i$ die konstante Gesamtmasse des Teilchensystems bezeichne. Somit ist die notwendige Anzahl an Segmenten $S = S(N, \beta)$ gegeben durch

$$\beta^{S-2} < (N m_1)^\epsilon \leq \beta^{S-1} \quad \text{bzw.} \quad S - 2 < \frac{\epsilon \log(N m_1)}{\log \beta} \leq S - 1.$$

Die Zahl der Wiederholungen nimmt also ab, falls $\beta \searrow 1$, was zu einer höheren Effizienz führt. Andererseits nimmt S zu und die Erzeugung der Segmentverteilung (3.11) wird zeitintensiver.

3.1.2 Mass-Flow-Algorithmus

Der Zustand des Mass-Flow-Prozesses läßt sich durch das ungeordnete Tupel

$$(y_1(t), \dots, y_{n(t)}(t))$$

darstellen, wobei $y_i(t)$ den Typ des i -ten Teilchens und $n(t)$ die zufällige Teilchenzahl zur Zeit t bezeichne. Gemäß der Transformation (2.35) kann die Zufallsvariable

$$\tilde{\xi}^N = \tilde{\xi}^N(\varphi, t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{n(t)} \frac{\varphi(y_i(t))}{y_i(t)} \quad (3.14)$$

zur Approximation von Funktionalen der Form (3.1) verwendet werden.

Zur effizienten Simulation des Mass-Flow-Prozesses können die in Abschnitt 3.1.1 eingeführten Methoden herangezogen werden. Zur Einfachheit beschränken wir uns auf Koagulationskerne, die der Ungleichung

$$K(x, y) \leq C x^\epsilon y^\epsilon$$

genügen. Dann läßt sich der asymmetrische Interaktionskern des Mass-Flow-Prozesses aus (2.40) durch die Produktmajorante

$$C x^\epsilon y^{\epsilon-1}$$

abschätzen, welche die Generierung einer Trajektorie bis zum Zeitpunkt $T > 0$ analog zum DSA ermöglicht:

1. Erzeuge den Anfangszustand (y_1, \dots, y_n) und setze $t = 0$.
2. Warte eine exponentialverteilte Zeit τ mit Rate

$$\hat{\lambda} = \frac{C}{N} \left[\sum_{i=1}^n y_i^\epsilon \sum_{j=1}^n y_j^{\epsilon-1} - \sum_{i=1}^n y_i^{2\epsilon-1} \right].$$

- 3.1. Wähle das erste Kollisionsteilchen i gemäß der Verteilung

$$\frac{y_i^\epsilon}{\sum_{l=1}^n y_l^\epsilon}, \quad i = 1, \dots, n. \quad (3.15)$$

- 3.2. Wähle das zweite Kollisionsteilchen j gemäß der Verteilung

$$\frac{y_j^{\epsilon-1}}{\sum_{l=1}^n y_l^{\epsilon-1}}, \quad j = 1, \dots, n. \quad (3.16)$$

- 3.3. Falls $i = j$, gehe zu Schritt 3.1.

4. Mit Wahrscheinlichkeit

$$\frac{K(y_i, y_j)}{C y_i^\epsilon y_j^\epsilon}$$

entferne y_i und, falls $y_i + y_j \leq b_N$, füge $y_i + y_j$ hinzu.

5. Setze $t = t + \tau$ und gehe zu Schritt 2, falls $t < T$.

Dabei kann die in Abschnitt 3.1.1 vorgestellte Prozedur zur Erzeugung der größenabhängigen Verteilungen (3.15) und (3.16) verwendet werden. Wir nennen die obige Beschreibung Mass-Flow-Algorithmus (MFA). Abschließend sei angemerkt, dass die Sprungrate des Mass-Flow-Prozesses beschränkt ist, falls $b_N < \infty$. Im Fall $b_N = \infty$ und eines sublinearen Kerns liefert Theorem 2.9 die Regularität des Mass-Flow-Prozesses und somit die Terminierung des MFA in endlicher Zeit.

3.1.3 Implementierung, Test und Anwendung

Das Laufzeitverhalten der Algorithmen hängt nicht nur von der Wahl der Majorante sondern auch von der speziellen softwaretechnischen Implementierung ab. Die strukturelle Übereinstimmung des DSA und MFA erleichtert die parallele Implementierung und Verwendung gemeinsamer Prozeduren. Der Einsatz einer Produktmajorante führt in beiden Algorithmen zur unabhängigen Generierung der Kollisionspartner. Trotzdem bleibt dies der rechenintensivste Teilschritt innerhalb des DSA und MFA. Der gemeinsame Aufruf der in Abschnitt 3.1.1 beschriebenen Prozedur zur Realisierung der größenabhängigen Verteilung stellt folglich eine Beurteilung beider Algorithmen nach ihrem Laufzeitverhalten auf

eine vernünftige Basis.

Die Verwaltung der einzelnen Gewichte der größenabhängigen Verteilung erfordert einen Speicheraufwand, der von der Anzahl der Segmente S und der maximalen Anzahl der Gewichte in den einzelnen Segmenten abhängt und somit von der Gesamtteilchenzahl und im Falle des MFA zusätzlich von der maximalen Größe b_N . Die Verwendung äußerst großer Teilchenzahlen für den DSA, wie etwa in Abschnitt 3.2.3 zur näheren Untersuchung des Gelationseffekts, stößt dabei an gewisse Grenzen. Im diskreten Fall empfiehlt sich deshalb eine getrennte Darstellung der Cluster unterhalb und oberhalb einer vorgegebenen Schranke L : für Cluster größer als L werden die Gewichte nach wie vor einzeln verwaltet, während für jedes $x \leq L$ nur noch das Gesamtgewicht aller x -Cluster Berücksichtigung findet. Die hierzu notwendigen Modifikationen des DSA lassen sich leicht vornehmen und sollen nicht weiter ausgeführt werden.

Explizite Lösungen

Die Funktionale der Form (3.1), die sich zur numerischen Untersuchung besonders eignen, sind die Konzentrationen

$$C(t, a, b) = \mu(t, [a, b]), \quad 0 < a \leq b, \quad (3.17)$$

und die Momente

$$m_a(t) = \int_{\mathcal{Z}} x^a \mu(t, dx), \quad a \geq 0. \quad (3.18)$$

Inbesondere ist $m_0(t)$ die Gesamtkonzentration und $m_1(t)$ die Gesamtmasse des Systems zur Zeit t .

Für den diskreten Fall stellen wir nun explizite Lösungen zu einigen speziellen Kernen und zur monodispersen Anfangsbedingung $\mu_0 = \delta_1$ vor, die wir u.a. zu Testzwecken heranziehen. Wir wählen dabei die äquivalente Darstellung mittels ihrer Dichte $c(t, x)$. Für den konstanten Kern

$$K(x, y) = 1$$

ergibt sich die Lösung

$$c(t, x) = \frac{4}{(2+t)^2} \left(\frac{t}{2+t} \right)^{x-1},$$

aus der sich die Momente

$$m_0(t) = \frac{2}{2+t}, \quad m_1(t) = 1, \quad m_2(t) = 1+t$$

berechnen lassen. Im Fall des linearen Kerns

$$K(x, y) = x + y$$

sind die Lösung und Momente gegeben durch

$$c(t, x) = e^{-t} \frac{x^{x-1}}{x!} (1 - e^{-t})^{x-1} e^{-x(1-e^{-t})}$$

und

$$m_0(t) = e^{-t}, \quad m_1(t) = 1, \quad m_2(t) = e^{2t}. \quad (3.19)$$

Der Produktkern

$$K(x, y) = x y \quad (3.20)$$

besitzt die eindeutige Lösung

$$c(t, x) = \begin{cases} \frac{x^{x-2}}{x!} t^{x-1} \exp(-xt) & : 0 \leq t \leq 1, \\ \frac{x^{x-2}}{x!} \exp(-x) t^{-1} & : 1 < t. \end{cases} \quad (3.21)$$

Sie wurde bereits in (2.18) vorgestellt. Weiterhin erhält man die Gesamtkonzentration

$$m_0(t) = \begin{cases} 1 - \frac{t}{2} & : 0 \leq t \leq 1, \\ \frac{1}{2t} & : 1 < t, \end{cases}$$

die Gesamtmasse

$$m_1(t) = \begin{cases} 1 & : 0 \leq t \leq 1, \\ \frac{1}{t} & : 1 < t, \end{cases} \quad (3.22)$$

und das zweite Moment

$$m_2(t) = \frac{1}{1-t}, \quad 0 \leq t < 1.$$

Zu dem Kern

$$K(x, y) = \frac{2 x^a y^a}{(x+y)^a - x^a - y^a}, \quad a \in (1, 2],$$

ist zwar keine explizite Lösung bekannt, doch erlaubt seine spezielle Form die Berechnung des Moments (siehe z.B. [2])

$$m_a(t) = \frac{1}{1-t}, \quad t \in [0, 1). \quad (3.23)$$

Für $a = 2$ stimmt dieser Kern mit dem Produktkern (3.20) überein.

Koagulationskerne

Sämtliche oben betrachteten Kerne und die meisten praktisch relevanten Kerne sind homogen im Sinne der Definition (2.20). Tabelle 3.1 gibt einen Überblick aller Kerne, die exemplarisch zur numerischen Analyse in dieser Arbeit herangezogen werden, einschließlich der verwendeten Majorante und dem Homogenitätsgrad. In den Abschnitten 3.2.1

und 3.2.2 werden wir allgemeine numerische Aspekte des DSA und MFA überwiegend unter Verwendung des zweiten und dritten Kerns vergleichen, die in der Aerosolwissenschaft eingesetzt werden. Im Abschnitt 3.2.3 werden wir hingegen gelationsspezifische Fragestellungen, die teilweise für die Polymerchemie von Bedeutung sind, anhand der letzten drei Kerne diskutieren. Bezüglich der Herkunft und physikalischen Interpretation einzelner Kerne verweisen wir auf die Publikationen, die in der letzten Spalte angegeben sind. Eine umfassendere Liste an gebräuchlichen Kernen findet sich u.a. in [22, Abschnitt 4.3] und [84] bzw. [3].

Tabelle 3.1: Zur numerischen Analyse verwendete Koagulationskerne.

i	$K_i(x, y)$	Majorante	γ	Bemerkung
1	1	1	0	[94]
2	$\sqrt{x^{-1} + y^{-1}} (x^{1/3} + y^{1/3})^2$	$\sqrt{8} (x^{2/3} + y^{2/3})$	1/6	[82], [59]
3	$\frac{1}{4} (x^{1/3} + y^{1/3})^3$	$x + y$	1	[80], [77]
4	$x + y$	$x + y$	1	
5	$x^a y^a$	$x^a y^a$	$2a$	$a \in (1/2, 1]$, [49]
6	$(xy^a + x^a y)/2$	xy	$1 + a$	$a \in (0, 1]$
7	$\frac{2x^a y^a}{(x+y)^a - x^a - y^a}$	$\frac{2}{2^a - 2} xy$	a	$a \in (1, 2]$, [2]

3.2 Numerischer Vergleich von DSA und MFA

Wir setzen in diesem Abschnitt den DSA und MFA zur Approximation von Funktionalen der Form (3.1) ein. Die Güte dieser Approximation läßt sich anhand des systematischen und statistischen Fehlers beurteilen und hängt einzig und allein von dem zugrundeliegenden Prozeß ab. Im ersten Abschnitt werden deshalb zunächst die Konvergenzeigenschaften beider Prozesse miteinander verglichen.

Für eine weitere Bewertung des DSA und MFA ist es notwendig, das Laufzeitverhalten einzubeziehen, welches von der Art und Weise der Erzeugung der einzelnen Trajektorien abhängt. Der Einfluß verschiedener Majoranten und ein Effizienzvergleich beider Algorithmen ist Gegenstand des zweiten Abschnitts.

In dem letzten Abschnitt setzen wir uns schließlich mit gelationsspezifischen Fragen auseinander, wie sie im Abschnitt 2.1.2 für den Koagulationsprozeß formuliert und im Abschnitt 2.3 im Zusammenhang mit dem Mass-Flow-Prozeß angeschnitten wurden.

Bei der folgenden numerischen Analyse beschränken wir uns auf den diskreten Fall und setzen eine monodisperse Anfangsbedingung voraus. Demzufolge initialisieren wir beide Algorithmen mit $n = N$ Monomeren, d.h. mit dem Zustand

$$x_i = y_i = 1, \quad i = 1, \dots, N.$$

3.2.1 Konvergenzeigenschaften

Für die sublinearen Kerne K_1 bis K_4 aus Tabelle 3.1, die wir zunächst betrachten wollen, existiert eine eindeutige Lösung μ , so dass das Approximationstheorem 2.2 die Verteilungskonvergenz des Koagulationsprozesses gegen μ impliziert. Da seine Teilchenzahl beschränkt ist, folgt unmittelbar

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \mathbb{E} \xi^N(\varphi, t) = I(\varphi, t) = \sum_{x=1}^{\infty} \varphi(x) c(t, x), \quad t \geq 0,$$

für jede Funktion $\varphi : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{R}$ mit kompaktem Träger. Hierbei sei $\xi^N = \xi^N(\varphi, t)$ durch (3.2) definiert und $c(t, x)$ bezeichne die Dichte von $\mu(t)$. Gleiches gilt für den Mass-Flow-Prozeß und die Zufallsvariable $\tilde{\xi}^N = \tilde{\xi}^N(\varphi, t)$ aus (3.14).

Das Funktional $I = I(\varphi, t)$ läßt sich somit unter Verwendung der Monte-Carlo-Methode annähern. Dazu werden R unabhängige Kopien des Marcus-Lushnikov-Prozesses gewählt, die zugehörigen zufälligen Funktionale ξ_1^N, \dots, ξ_R^N berechnet und der empirische Mittelwert

$$\bar{\xi}_R^N = \frac{1}{R} \sum_{i=1}^R \xi_i^N$$

zur Schätzung von $\mathbb{E} \xi^N$ verwendet. Der Fehler bei der Approximation von I setzt sich aus zwei Größen zusammen, dem systematischen Fehler

$$e_{\text{sys}}^N = e_{\text{sys}}^N(\varphi, t) = |\mathbb{E} \xi^N - I|$$

und dem statistischen Fehler

$$\bar{\xi}_R^N - \mathbb{E} \xi^N.$$

Die Varianz von ξ^N charakterisiert ausreichend den statistischen Fehler und kann unter Zuhilfenahme des empirischen Mittelwerts und des zweiten empirischen Moments

geschätzt werden,

$$\text{Var } \xi^N \approx \frac{1}{R} \sum_{i=1}^R [\xi_i^N]^2 - [\bar{\xi}_R^N]^2 .$$

In gleicher Weise kann der systematische Fehler \tilde{e}_{sys}^N für die vom Mass-Flow-Prozeß abgeleitete Zufallsvariable $\tilde{\xi}^N$ definiert und das Funktional I und die Varianz von $\tilde{\xi}^N$ geschätzt werden.

Systematischer Fehler

Wir wollen den systematischen Fehler beider Algorithmen exemplarisch anhand des Koagulationskerns K_2 aus Tabelle 3.1 untersuchen. Mangels einer exakten Lösung für diesen Kern verwenden wir das Ergebnis einer DSA-Simulation mit anfänglich 10^8 Monomeren als Referenzkurve. Abbildung 3.1 enthält die gestrichelte Referenzkurve und verdeutlicht das Konvergenzverhalten für das Funktional $C(t, 100, 200)$ und das zweite Moment $m_2(t)$ aus (3.17) bzw. (3.18). Die linke Spalte zeigt das DSA-Ergebnis für $N = 2^9, 2^{10}, \dots, 2^{13}$. Die rechte Spalte enthält das MFA-Ergebnis für $\tilde{N} = 16$; der hier gewählte Parameterwert $b_{\tilde{N}} = 1000$ für Schritt 4 des MFA hat dabei kaum Einfluß auf das Ergebnis und kann für den sublinearen Kern K_2 theoretisch auf ∞ gesetzt werden ¹.

Abbildung 3.1 gibt einen ersten Eindruck davon, dass der MFA einen viel kleineren systematischen Fehler besitzt. Dies läßt sich nur zum Teil auf die Reduktion der Clusterzahl im DSA zurückführen. Diese nimmt zwar auf dem Zeitintervall $[0, 30]$ um einen Faktor von etwa 200 ab; die MFA-Kurve für $\tilde{N} = 16$ liegt jedoch näher an der Referenzkurve als die DSA-Kurve für $N = 2^{12} > 16 \cdot 200$. Diese Beobachtung soll näher untersucht werden.

Dazu betrachten wir das zweite Moment $m_2(t)$ und tragen zunächst die Größen $N e_{\text{sys}}^N(t)$ und $\tilde{N} \tilde{e}_{\text{sys}}^{\tilde{N}}(t)$ ab - links in Abbildung 3.2 für den DSA und $N = 2^{11}$ (durchgezogen) bzw. $N = 2^{13}$ (gestrichelt), rechts für den MFA und $\tilde{N} = 16$ (durchgezogen) bzw. $\tilde{N} = 64$ (gestrichelt). Die gute Übereinstimmung der durchgezogenen und gestrichelten Kurve deutet an, dass beide Algorithmen die gleiche Konvergenzordnung besitzen. Solche numerischen Untersuchungen sind allerdings nur eingeschränkt möglich, da sie äußerst schmale Konfidenzbänder zur präzisen Bestimmung des systematischen Fehlers erfordern.

Abbildung 3.2 legt die asymptotische Darstellung

$$e_{\text{sys}}^N(t) \approx \frac{\gamma(t)}{N} \quad \text{und} \quad \tilde{e}_{\text{sys}}^{\tilde{N}}(t) \approx \frac{\tilde{\gamma}(t)}{\tilde{N}}$$

für den systematischen Fehler des DSA bzw. MFA nahe. Es fällt auf, dass γ in viel stärkerem Maße als $\tilde{\gamma}$ steigt, und es gilt den Einfluß der abnehmenden Clusterzahl des DSA auf γ herauszuarbeiten. Dazu tragen wir den Quotienten

$$\frac{e_{\text{sys}}^N(t) N m_0(t)}{\tilde{e}_{\text{sys}}^{\tilde{N}}(t) \tilde{N}} \tag{3.24}$$

¹ Im Fall des linearen Kerns ist das zweite Moment exakt durch (3.19) gegeben. Die numerischen Ergebnisse für diesen Testfall zeigen, dass höhere Momente $m_a(t)$, $a = 2, 3, \dots$, tatsächlich mittels ξ^N und $\tilde{\xi}^N$ korrekt approximiert werden können.

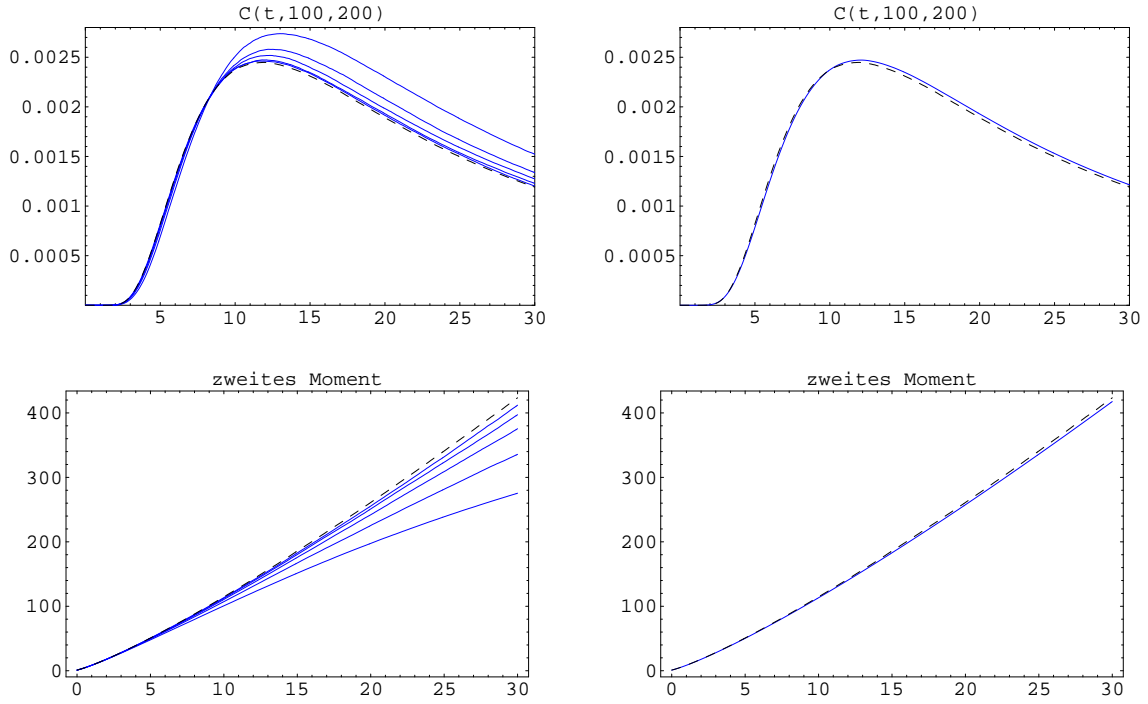


Abbildung 3.1: Approximation der Funktionale (3.17) und (3.18) für den Kern K_2 - links: DSA, rechts: MFA.

für die bereits in Abbildung 3.2 verwendeten Anfangsteilchenzahlen ab. Abbildung 3.3 zeigt einen relativ zeitunabhängigen Quotienten, der die Schlußfolgerung

$$\gamma(t) m_0(t) \approx c \tilde{\gamma}(t)$$

zuläßt. Die Konstante c liegt für dieses Beispiel etwa bei 6, was bedeutet, dass selbst unter Berücksichtigung der abnehmenden Clusterzahl der systematische Fehler des MFA sechsmal kleiner als der des DSA ist.

Statistischer Fehler

Der statistische Fehler wird durch die Varianz von ξ^N bzw. $\tilde{\xi}^N$ charakterisiert, welche sich asymptotisch proportional zu N^{-1} verhält. Zum Vergleich der Varianzen betrachten wir den Koeffizienten

$$\kappa_{\text{var}} = \kappa_{\text{var}}(\varphi, t) = \frac{\lim_{N \rightarrow \infty} N \text{Var} \xi^N}{\lim_{N \rightarrow \infty} N \text{Var} \tilde{\xi}^N}. \quad (3.25)$$

Abbildung 3.4 verdeutlicht die Varianzreduktion durch den MFA. In beiden Grafiken wurde der Koeffizient für die Konzentrationen $c(t, x)$, $1 \leq x \leq 400$, abgetragen - links für den Kern K_2 zum Zeitpunkt $t = 30$ und rechts für den konstanten Kern K_1 zum Zeitpunkt $t = 200$. Die Fluktuationen resultieren aus der empirischen Schätzung von κ_{var} .

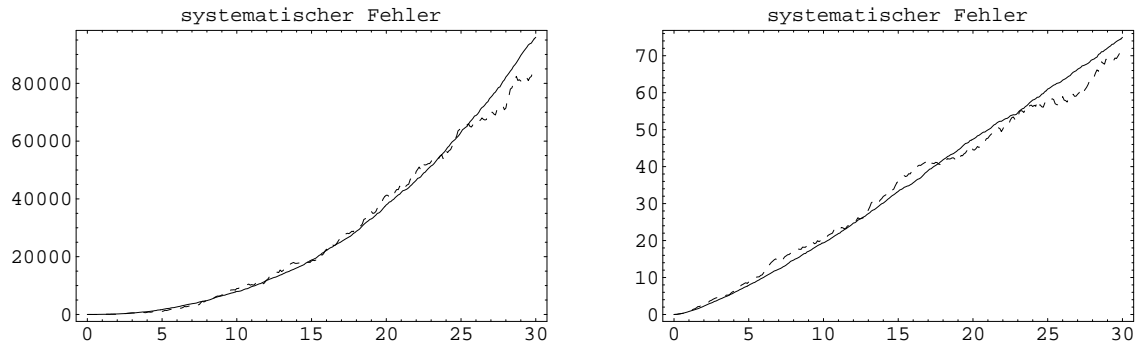


Abbildung 3.2: Normierter systematischer Fehler für $m_2(t)$ und Kern K_2 - links: DSA, rechts: MFA.

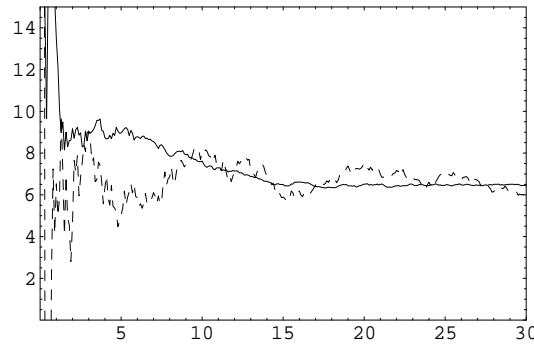


Abbildung 3.3: Quotient (3.24) für $m_2(t)$ und Kern K_2 .

Die durchgezogene Linie ist das Ergebnis der Methode der kleinsten Quadrate und liefert die Näherung

$$\kappa_{\text{var}}(1_x, t) \approx x .$$

Diese Formel behält für andere Kerne und Zeitpunkte in der Prä-Gelationsphase ihre Gültigkeit und spiegelt die Transformation (2.35) numerisch wieder.

3.2.2 Laufzeitverhalten und Effizienz

Die Beurteilung des Laufzeitverhaltens erfolgt unter mehreren Gesichtspunkten: Zunächst soll der Einfluß verschiedener Majoranten untersucht werden. Anschließend wird der Rechenaufwand für den DSA und MFA bei Verwendung der gleichen Majorante ermittelt und die Effizienz beider Algorithmen unter Berücksichtigung ihrer Varianzeigenschaften miteinander verglichen.

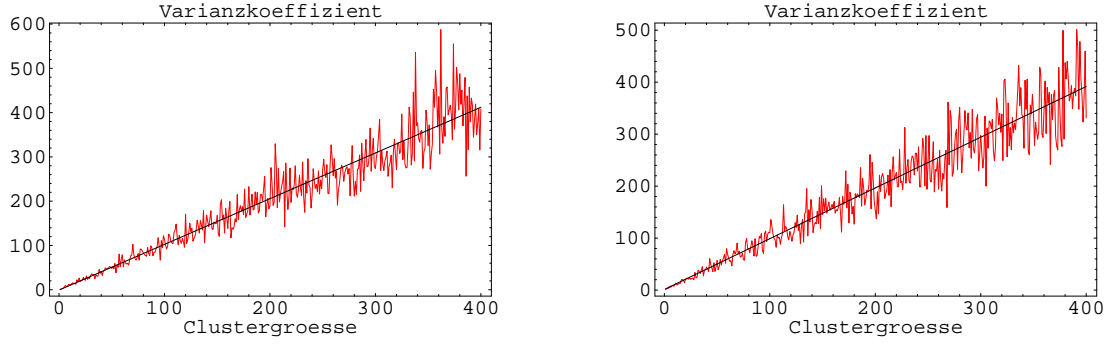


Abbildung 3.4: Varianzkoeffizient (3.25) für $c(t, x)$, $1 \leq x \leq 400$ - links: Kern K_2 und $t = 30$, rechts: Kern K_1 und $t = 200$.

Majorantenvergleich

Die mittlere Rechenzeit wird im wesentlichen von der Gesamtzahl aller Sprünge und dem Aufwand zur Erzeugung eines Kollisionspaares bestimmt. Die Abbildungen 3.5 - 3.7 geben Auskunft über diese Faktoren im Fall des DSA unter Verwendung des Kerns K_3 aus Tabelle 3.1 und $N = 10^6$ Anfangsteilchen. Die durchgezogenen Kurven beziehen sich auf die Maximummajorante (3.6), die üblicherweise bei der Simulation des Marcus-Lushnikov-Prozesses für solche komplexen Kerne zum Einsatz kommt, und die gestrichelten auf die lineare Majorante, die gemäß der Ungleichung

$$\frac{1}{4}(x + y) \leq K_3(x, y) \leq x + y$$

besonders geeignet scheint.

Die Gesamtzahl aller Sprünge läßt sich der linken Grafik in Abbildung 3.5 entnehmen. Sie setzt sich aus der Zahl der realen Sprünge, die unabhängig von der Majorante ist und sich asymptotisch wie $N(1 - m_0(t))$ verhält, und der Zahl der fiktiven Sprünge zusammen, die Aufschluß über die Eignung der Majorante gibt (siehe (3.5)). Das rechte Bild zeigt den relativen Anteil der fiktiven Sprünge, der zum Zeitpunkt $t = 4$ etwa 13% bzw. 97% beträgt.

Im Fall der Maximummajorante wird das Kollisionspaar nach Beispiel 3.2 gleichverteilt erzeugt. Im Fall der linearen Majorante ist jedoch die Realisierung der größenabhängigen Verteilung keineswegs trivial und die Zahl der Wiederholungen gemäß (3.12) zur Generierung eines Kollisionsclusters von Interesse. Abbildung 3.6 zeigt den relativen Anteil der Wiederholungen für den Fall exponentiell wachsender Segmentgrenzen (3.13) und $\beta = 2$. Der Anteil von etwa 35% ist konsistent mit der oberen Schranke $1 - \beta^{-1}$ für die Wahrscheinlichkeit einer Wiederholung.

Abbildung 3.7 gibt schließlich Auskunft über die benötigte mittlere Rechenzeit. Aus ihr geht ein beträchtlicher Zeitgewinn beim Einsatz der linearen Majorante hervor. Ein analoger Majorantenvergleich kann für den MFA ebenfalls vorgenommen werden. Die dem MFA zugrundeliegende Transformation (2.35) führt zu einer Umgewichtung zugunsten

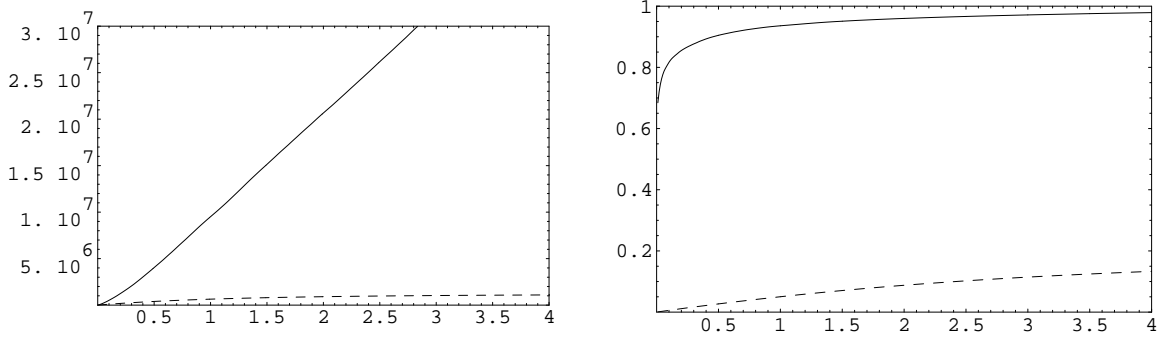


Abbildung 3.5: Gesamtzahl der Sprünge (links) und relativer Anteil der fiktiven Sprünge (rechts) im Fall des DSA für den Kern K_3 .

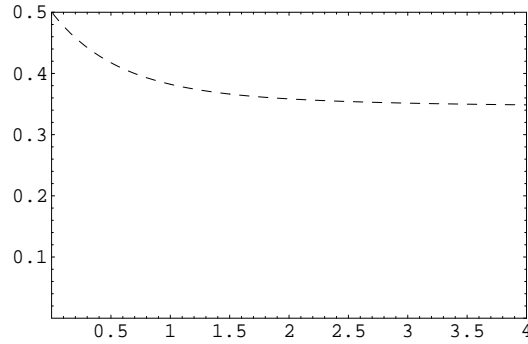


Abbildung 3.6: Anteil erfolgloser Versuche zur Erzeugung eines Kollisionsclusters.

großer Cluster und somit zu einer Verstärkung des in Abbildung 3.5 beobachteten Effekts. Aus diesem Grund setzen wir unsere Untersuchungen zum Laufzeitverhalten im nächsten Abschnitt ohne weitere Betrachtung der Maximummajorante fort.

Effizienz

Ein Konfidenzintervall für den Erwartungswert von ξ^N ist asymptotisch durch

$$\left[\bar{\xi}_R^N - \lambda_p \sqrt{\frac{\text{Var } \xi^N}{R}}, \bar{\xi}_R^N + \lambda_p \sqrt{\frac{\text{Var } \xi^N}{R}} \right]$$

gegeben, wobei λ_p das Quantil der Standardnormalverteilung zum Konfidenzniveau p sei. Analog lässt sich ein Konfidenzintervall für den Erwartungswert von $\tilde{\xi}^N$ konstruieren.

Abbildung 3.8 zeigt Konfidenzbänder zum Niveau $p = 0.999$ für verschiedene Summenfunktionale (3.17). Die linke und rechte Spalte sind das Ergebnis einer DSA- bzw. MFA-Simulation für den Kern K_3 unter Verwendung der linearen Majorante. Dabei wurden $N = 10^6$ bzw. $N = 10^3$ Anfangsmonomere verwendet und die Zahl der Wiederholungen

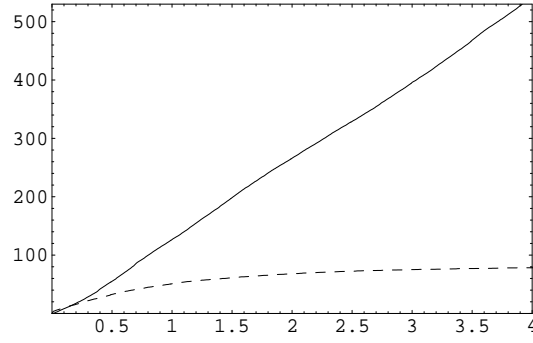


Abbildung 3.7: Mittlere Rechenzeit.

$R = 100$ bzw. $R = 490$ wurde so gewählt, dass beide Algorithmen auf dem Beobachtungsintervall $[0, 8]$ etwa gleiche Rechenzeit beanspruchen. Die Abbildung verdeutlicht die Varianz reduzierenden Eigenschaften des MFA - diesmal unter Berücksichtigung der Laufzeit.

Wir wollen nun das Verhältnis zwischen Rechenaufwand und Varianz im Detail klären. Die Effizienz beider Algorithmen läßt sich danach bemessen, wieviel Rechenzeit zur Approximation des Funktional I bei vorgegebener Genauigkeit aufgebracht werden muß. Zur Beantwortung dieser Frage sei zunächst $\epsilon > 0$ und N, \tilde{N} genügend groß, so dass die systematischen Fehler des DSA und MFA ungefähr gleich ϵ sind. Um ein Konfidenzintervall der Breite 2ϵ zu erzeugen, sind

$$R \approx \left(\frac{\lambda_p}{\epsilon} \right)^2 \text{Var } \xi^N \quad \text{bzw.} \quad \tilde{R} \approx \left(\frac{\lambda_p}{\epsilon} \right)^2 \text{Var } \tilde{\xi}^{\tilde{N}}$$

Wiederholungen notwendig. Unter Verwendung der mittleren Rechenzeit $r^N = r^N(t)$ bzw. $\tilde{r}^{\tilde{N}} = \tilde{r}^{\tilde{N}}(t)$ zur Erzeugung einer Trajektorie bis zur Zeit t erhalten wir die Rechenzeit $R r^N$ im Fall des DSA und $\tilde{R} \tilde{r}^{\tilde{N}}$ im Fall des MFA. Der Quotient

$$\frac{\text{Var } \xi^N}{\text{Var } \tilde{\xi}^{\tilde{N}}} \frac{r^N}{\tilde{r}^{\tilde{N}}}$$

bringt somit den zeitlichen Gewinnfaktor des MFA gegenüber dem DSA bei der Approximation des Funktional I zum Ausdruck.

Da sich die Varianzen und die mittleren Rechenzeiten asymptotisch proportional zu N^{-1} bzw. N verhalten, ist es nach den obigen Ausführungen sinnvoll, einen Effizienzvergleich anhand der Größe

$$\kappa = \kappa(\varphi, t) = \kappa_{\text{var}}(\varphi, t) \cdot \kappa_{\text{eff}}(t) \quad (3.26)$$

vorzunehmen, wobei der Varianzkoeffizient $\kappa_{\text{var}}(\varphi, t)$ gemäß (3.25) definiert ist und der Laufzeitkoeffizient

$$\kappa_{\text{eff}}(t) = \frac{\lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} r^N(t)}{\lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \tilde{r}^N(t)} \quad (3.27)$$

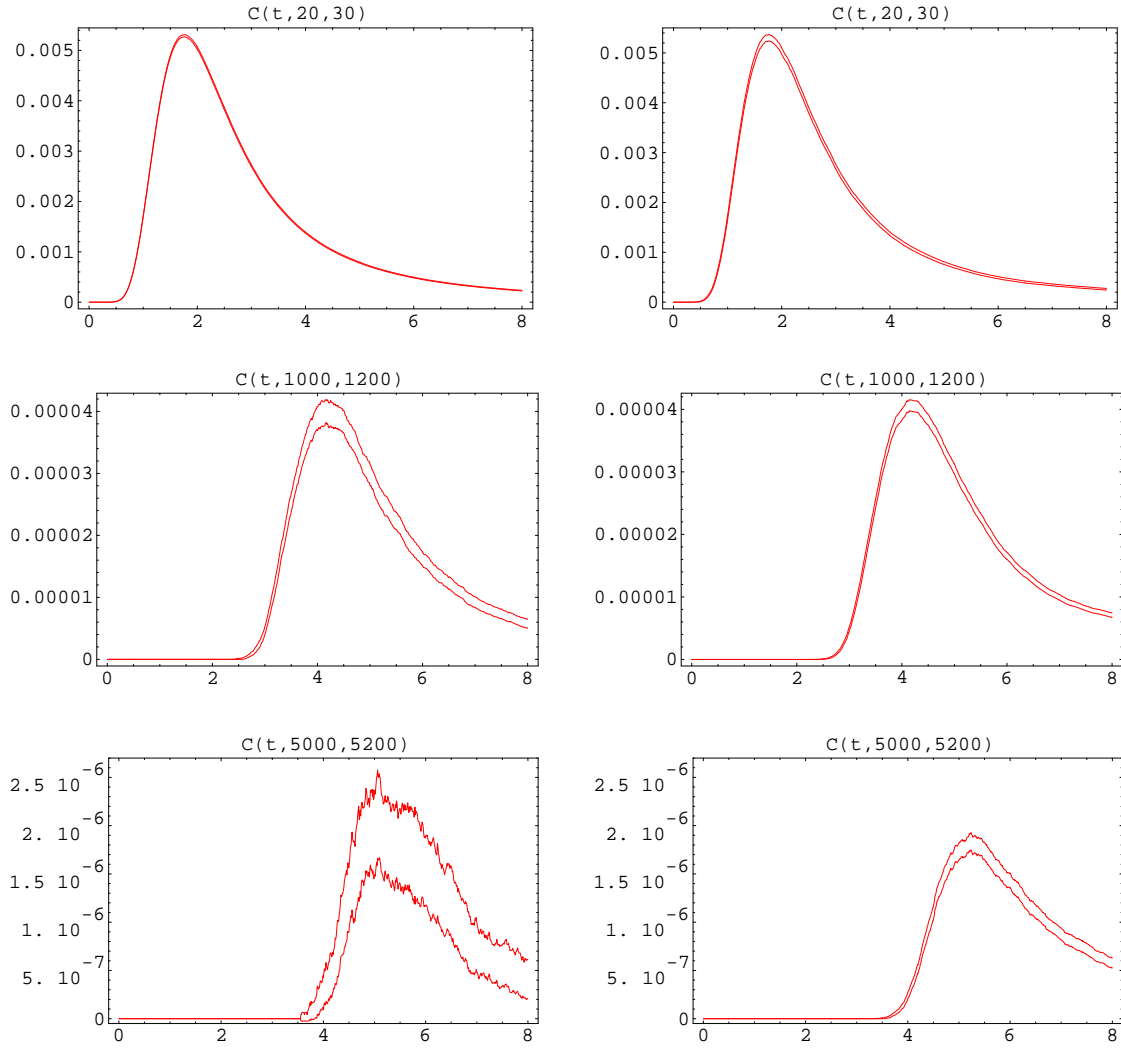


Abbildung 3.8: Konfidenzbänder für verschiedene Summenkonzentrationen (3.17) unter Verwendung des Kerns K_3 - links: DSA, rechts: MFA.

unabhängig von der Funktion φ ist.

Abbildung 3.9 zeigt für den Kern K_2 die Koeffizienten $\kappa_{\text{var}}(x^2, t)$ bzgl. dem zweiten Moment (links) und $\kappa_{\text{eff}}(t)$ (rechts). Mit zunehmender Zeit verteilt sich die Gesamtkonzentration infolge der Koagulation auf immer größere Cluster und die in Abbildung 3.4 illustrierten Varianzeigenschaften des MFA finden bei der Approximation des zweiten Moments immer stärkere Ausprägung. Der Preis für diese Varianzreduktion liegt im steigenden Rechenaufwand relativ zum DSA. Dennoch resultiert ein beachtlicher Zeitgewinn, wie die linke Grafik in Abbildung 3.10 verdeutlicht. Die rechte Grafik zeigt den entsprechenden Gewinnfaktor κ im Fall des konstanten Kerns K_1 ebenfalls für das zweite Moment und bestätigt die gute Effizienz des MFA.

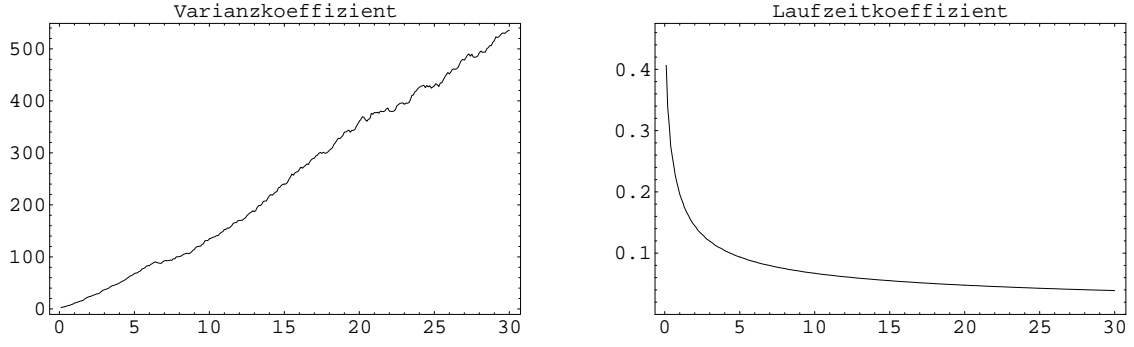


Abbildung 3.9: Varianz- und Laufzeitkoeffizient (3.27) bzw. (3.25) für den Kern K_2 und das zweite Moment.

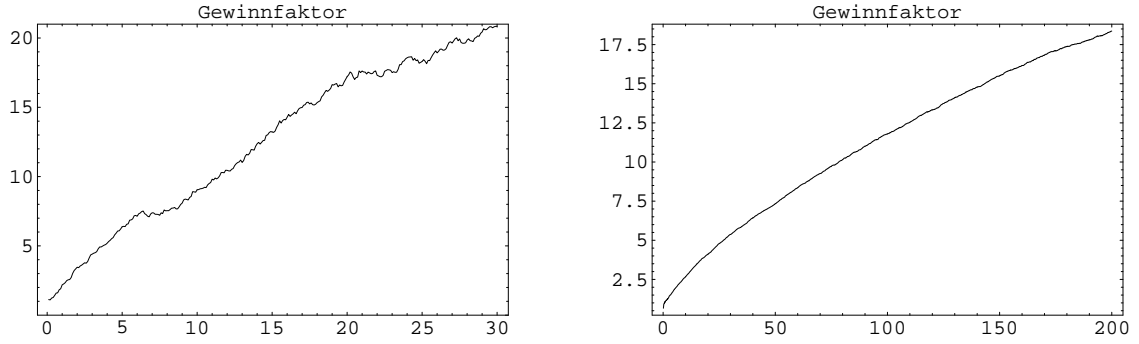


Abbildung 3.10: Gewinnfaktor (3.26) für das zweite Moment und die Kerne K_2 (links) und K_1 (rechts).

3.2.3 Gelationsspezifische Untersuchungen

Wir beginnen unsere Untersuchungen des Gelationsphänomens mit dem Produktkern $K(x, y) = xy$. Die eindeutige Lösung der Koagulationsgleichung zur monodispersen Anfangsbedingung ist für diesen Kern durch (3.21) gegeben. Abbildung 3.11 zeigt die exakten (gestrichelten) Kurven zweier Summenfunktionale (3.17) und ihre MFA-Approximation für $N = b_N = 10^5$. Ihre gute Übereinstimmung legt die Schlußfolgerung nahe, dass der Mass-Flow-Prozeß über den Gelationszeitpunkt $t_g = 1$ hinaus gegen die Lösung der Koagulationsgleichung konvergiert und dass die Bedingung (2.46) im Approximationstheorem 2.10 ersatzlos gestrichen werden kann. Die übrigen Voraussetzungen (2.38) und (2.45) führen dann zu der Klasse der Kerne, für die

$$K(x, y) \leq cxy$$

gilt.

Im Gegensatz zum Mass-Flow-Prozeß konvergiert der Koagulationsprozeß in der Post-Gelationsphase gegen die Funktion (2.21). Dieses unterschiedliche Verhalten kommt be-

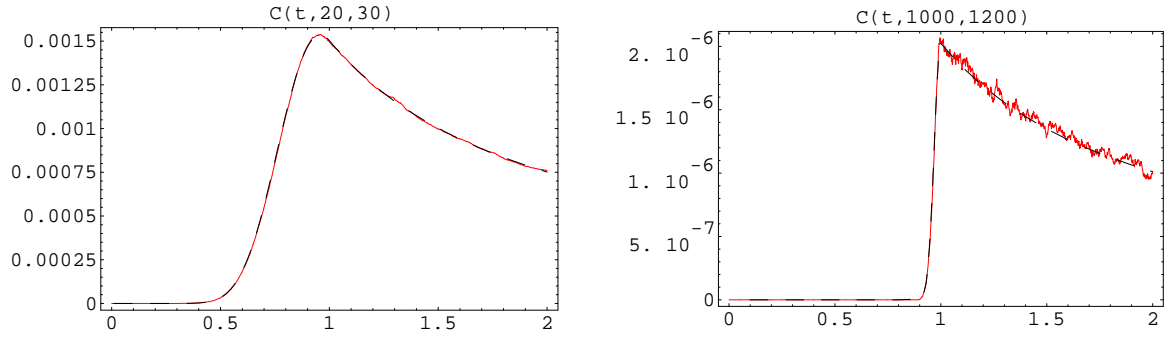


Abbildung 3.11: MFA-Approximation der Summenkonzentration für $K(x, y) = xy$.

sonders stark bei der Approximation der Gelmasse

$$g(t) = m_1(0) - m_1(t)$$

zum Ausdruck, welche für den Produktkern mittels (3.22) gegeben ist. Wir nutzen die Tatsache, dass der MFA Teilchen oberhalb der Schranke $b_N < \infty$ verwirft, und setzen zur näherungsweisen Bestimmung

$$g^N(t) = \frac{n^N(t)}{N},$$

wobei $n^N(t)$ die Teilchenzahl zum Zeitpunkt t bezeichne. Zum Vergleich betrachten wir den maximalen Cluster $M_1^N(t)$ des Koagulationsprozesses und seine Masse

$$G^N(t) = \frac{M_1^N(t)}{N},$$

die gemäß (2.22) gegen $\hat{g}(t)$ konvergiert.

Abbildung 3.12 gibt die exakten Funktionen $\hat{g}(t)$ (obere gestrichelte Kurve) und $g(t)$ (untere gestrichelte Kurve) wieder. Das DSA-Ergebnis zu $G^N(t)$ (grau) liegt bereits für $N = 10^7$ auf dem Limes $\hat{g}(t)$. Die MFA-Simulation zu $g^N(t)$ (grau) stimmt mit $g(t)$ für $N = b_N = 10^5$ überein. Diese Übereinstimmung bestätigt unsere Vermutung für allgemeine gelierende Kerne, dass

$$g(t) = \lim_{N \rightarrow \infty} g^N(t), \quad (3.28)$$

falls $b_N < \infty$ und $b_N \rightarrow \infty$. Für $b_N = \infty$ gehen wir außerdem davon aus, dass der Mass-Flow-Prozeß explodiert und dass die Explosionszeiten gegen t_g konvergieren.

Das unterschiedliche Konvergenzverhalten der beiden Prozesse lädt dazu ein, die Untersuchungen auf weitere gelierende Kerne auszudehnen. Da exakte Lösungen dann nicht mehr zur Verfügung stehen, verwenden wir die MFA-Approximation als Indikator für die bzgl. der Koagulationsgleichung korrekte Gelmasse. Die linke Grafik in Abbildung 3.13 zeigt die Größen G^N und g^N für den Kern K_6 mit $a = 1/2$. Die Simulationsergebnisse liegen für unterschiedliche Teilchenzahlen (DSA: $N = 10^7, 10^8$, obere Kurven - MFA: $N = 10^4, 10^5$,

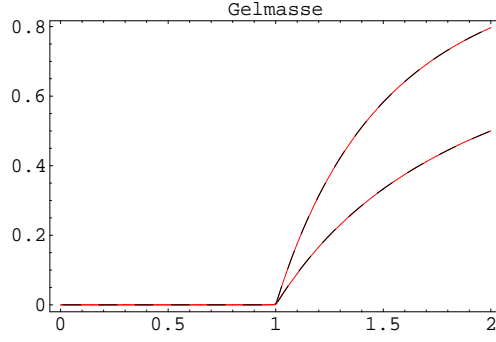


Abbildung 3.12: Approximation der Gelmasse für $K(x, y) = xy$.

$b_N = 10^5$, untere Kurven) jeweils übereinander. Die rechte Grafik präsentiert die gleiche Situation für den Kern K_7 mit $a = 3/2$. Die Parameterwahl führt in beiden Fällen zu dem Homogenitätsgrad $\gamma = 3/2$. Zum Kern K_7 ist das Moment $m_a(t)$ durch (3.23) gegeben. Die rechte Grafik belegt, dass - wie bereits in [2] vermutet - sein Divergenzzeitpunkt mit der Gelationszeit $t_g = 1$ übereinstimmt.

Abbildung 3.13 reflektiert ein Verhalten des Koagulationsprozesses, das wir bereits für den Produktkern kennengelernt haben: Der maximale Cluster besitzt für $t > t_g$ die Größenordnung $\Theta(N)$, reagiert mit den Sol-Clustern und nimmt im Limes Einfluß auf deren Konzentration. Wir stellen hier die Vermutung auf, dass jeder Kern mit Homogenitätsgrad $\gamma \in (1, 2]$, welcher der Bedingung

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{K(x, y)}{x} \sim y^{\gamma-1} \quad (3.29)$$

genügt, also insbesondere die Kerne K_6 und K_7 , zu einer Sol-Gel-Reaktivität führt, wie sie von Erdős und Rényis klassischem Resultat (2.22) her bekannt ist. $G^N(t)$ konvergiert also gegen eine Funktion $\hat{g}(t)$, die nicht als Gelmasse zu der Lösung der Koagulationsgleichung interpretiert werden kann.

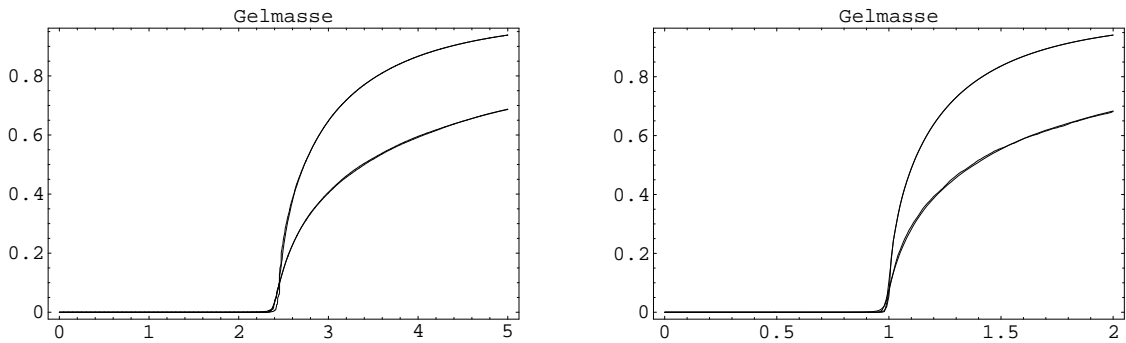


Abbildung 3.13: Approximation der Gelmasse für die Kerne K_6 (links) und K_7 (rechts).

Gelierende Kerne, für die

$$\lim_{x+y \rightarrow \infty} \frac{K(x, y)}{x y} = 0 \quad (3.30)$$

gilt und somit der Grenzwert (3.29) gegen Null konvergiert, führen zu einem Verhalten, welches sich von den obigen Ergebnissen signifikant unterscheidet. Wir wollen dies exemplarisch anhand des Kerns

$$K_5(x, y) = x^a y^a, \quad a \in (1/2, 1),$$

verdeutlichen.

Nach Theorem 2.2 lösen die schwachen Limiten des Koagulationsprozesses in diesem Fall fast sicher die Koagulationsgleichung, womit eine Sol-Gel-Reaktivität im Limes ausgeschlossen ist. Über die Entstehung des Gels aus dem Teilchensystem heraus gibt diese Tatsache jedoch keinen Aufschluß. Mathematisch ist bewiesen (siehe [50], [51]), dass der maximale Cluster $M_1^N(t)$ in der Post-Gelationsphase für jedes $\epsilon > 0$ von größerer Ordnung als $N^{1-\epsilon}$ ist. Spouge [87] vermutet darüberhinaus, dass sich der maximale Cluster mit der korrekten Gelmasse $g(t)$ identifizieren läßt, dass also

$$g(t) = \lim_{N \rightarrow \infty} G^N(t).$$

Aldous tendiert hingegen zu der Meinung (siehe [3, Abschnitt 5.2]), dass

$$M_1^N(t) = o(N), \quad t \geq 0. \quad (3.31)$$

In Abbildung 3.14 werden die numerischen Ergebnisse für den Kern K_5 mit $a = 0.8$ dargestellt. Rechts sehen wir die MFA-Approximation $g^N(t)$ für $N = 10^2, \dots, 10^5$ und $b_N = 100 N$. Die Kurven für $N = 10^4$ und $N = 10^5$ liegen fast aufeinander, was noch einmal als deutliches Indiz für die Konvergenz (3.28) gewertet werden kann. Die Kurven in der linken Grafik entsprechen von oben nach unten dem DSA-Ergebnis für G^N und $N = 10^5, \dots, 10^9$. Die gestrichelte Kurve geht auf den MFA für $N = 10^5$ zurück und wurde aus dem rechten Bild übertragen.

Trotz der riesigen Teilchenzahlen, mit denen der DSA initialisiert wurde, läßt sich aus der rechten Grafik keine numerische Konvergenz zugunsten einer der widersprüchlichen Auffassungen ablesen. Falls Spouges Vermutung richtig ist, erwarten wir die Konvergenz der DSA-Kurven gegen die gestrichelte Kurve. Falls (3.31) gilt, so sollten die Kurven gegen die Zeitachse konvergieren. Weiterhin besteht die Möglichkeit, dass sie sich zwischen der gestrichelten Kurve und der Zeitachse stabilisieren. Abbildung 3.14 zeigt die Grenzen der numerischen Validierung von Hypothesen bzgl. des Gelationsphänomens auf; wir müssen leider die Frage unbeantwortet lassen, ob der Masseverlust für Kerne mit der Eigenschaft (3.30) auf der Formation eines oder mehrerer 'unendlich' großer Cluster beruht.

Obwohl das linke Bild keine eindeutige Schlußfolgerung über das Verhalten des maximalen Clusters zuläßt, so zeigt es doch, dass der DSA völlig ungeeignet zur Gelapproximation ist, selbst wenn Spouges Vermutung zutreffen sollte. Die schlechten Konvergenzeigenschaften des DSA haben einen nachteiligen Effekt auf den systematischen Fehler bei der Berechnung

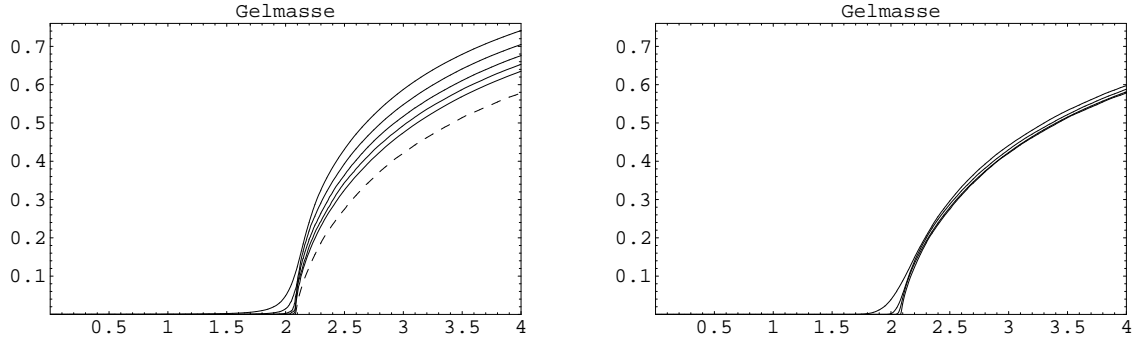


Abbildung 3.14: Approximation der Gelmasse für den Kern K_5 mit $a = 0.8$.

anderer Funktionale. Abbildung 3.15 gibt die Näherungen für Summenkonzentrationen im Fall des Kerns K_5 mit $a = 0.8$ wieder. Das gestrichelt dargestellte MFA-Ergebnis für $N = b_N = 10^5$ ist numerisch stabil. Die durchgezogenen Kurven entsprechen von unten nach oben der DSA-Approximation für $N = 10^5, \dots, 10^9$. Sie weichen bis zum Zeitpunkt $t_g \approx 2.1$ kaum von der MFA-Kurve ab und lassen danach eine Konvergenz gegen die MFA-Kurve vermuten.

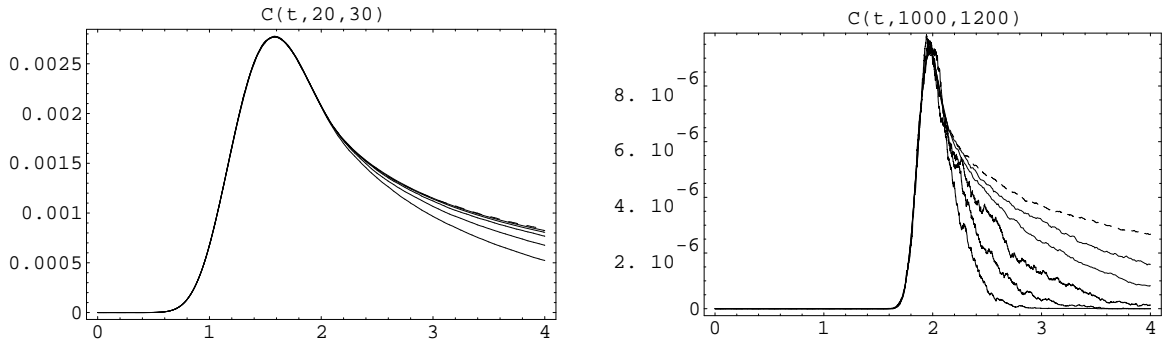


Abbildung 3.15: Approximation der Summenkonzentration für den Kern K_5 mit $a = 0.8$ mittels DSA (durchgezogen) und MFA (gestrichelt).

Für die Prä-Gelationsphase $[0, t_g]$ macht es Sinn, die Effizienzanalyse aus Abschnitt 3.2.2 fortzusetzen. Analog zur Abbildung 3.8 geben wir in Abbildung 3.16 die Konfidenzbänder für einige Funktionale wieder. Dabei wurde der DSA mit $N = 10^7$ (linke Spalte) und der MFA mit $N = b_N = 10^5$ (rechte Spalte) initialisiert. Die Konfidenzbänder wurden mithilfe von $R = 10$ bzw. $R = 30$ Wiederholungen konstruiert, welche auf eine fast identische Simulationszeit führen. Die gestrichelte Referenzkurve repräsentiert in beiden Spalten die DSA-Approximation für $N = 10^9$ Anfangsmomere. Die Abbildung illustriert eine zunehmende Effizienz des MFA im Bereich großer Cluster, wie wir sie bereits für sublineare Kerne kennengelernt haben. Wir wollen mit dieser Bemerkung unsere numerischen Untersuchungen des Gelationsphänomens abschließen.

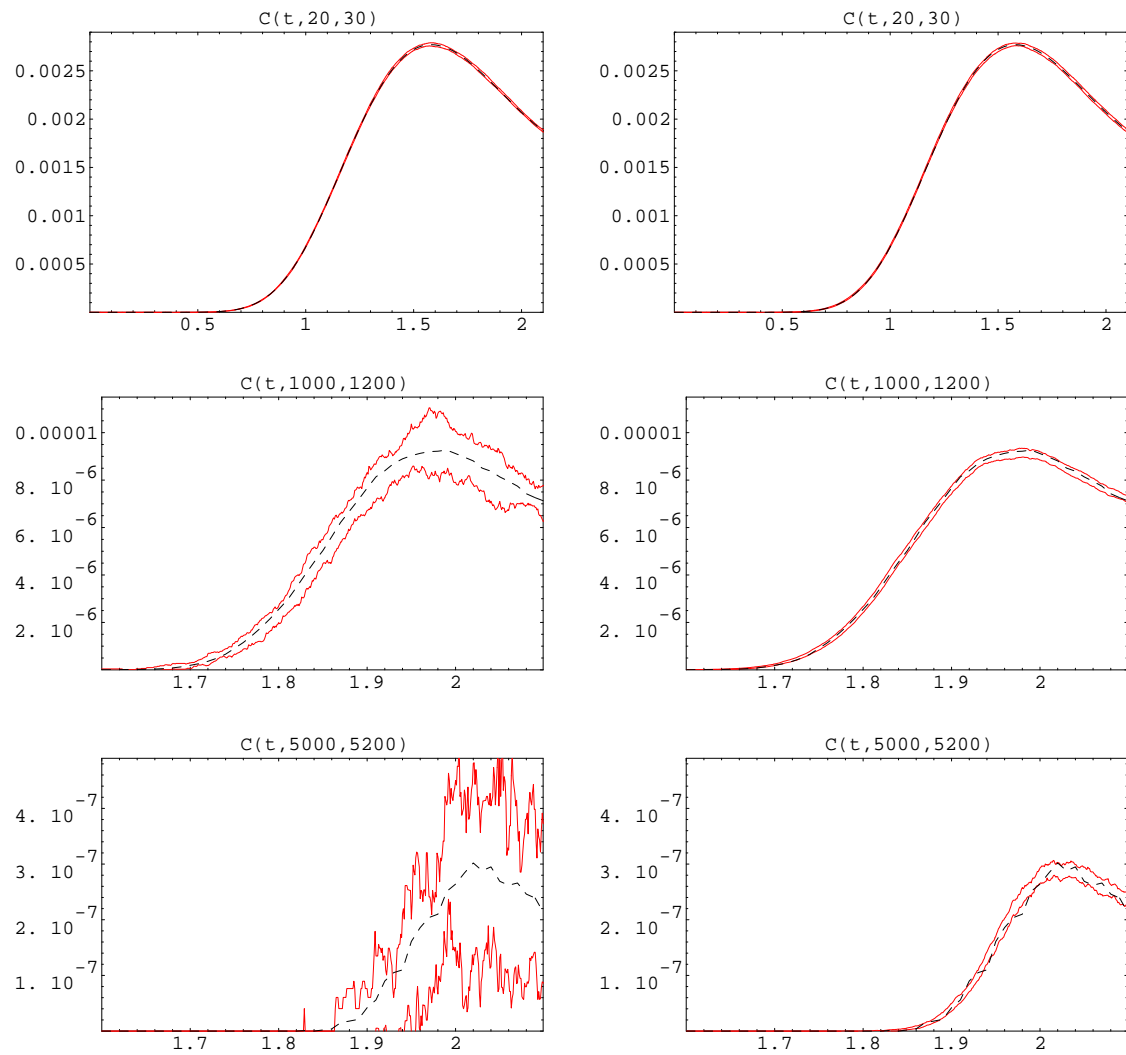


Abbildung 3.16: Konfidenzbänder für verschiedene Summenkonzentrationen unter Verwendung des Kerns K_5 mit $a = 0.8$ - links: DSA, rechts: MFA.

Literaturverzeichnis

- [1] M. Aizenman and T. A. Bak. Convergence to equilibrium in a system of reacting polymers. *Comm. Math. Phys.*, 65(3):203–230, 1979.
- [2] D. Aldous. Emergence of the giant component in special Marcus-Lushnikov processes. *Random Structures Algorithms*, 12(2):179–196, 1998.
- [3] D. J. Aldous. Deterministic and stochastic models for coalescence (aggregation and coagulation): a review of the mean-field theory for probabilists. *Bernoulli*, 5(1):3–48, 1999.
- [4] H. Babovsky. *Die Boltzmann-Gleichung: Modellbildung—Numerik—Anwendungen*. B. G. Teubner, Stuttgart, 1998.
- [5] H. Babovsky. On a Monte Carlo scheme for Smoluchowski’s coagulation equation. *Monte Carlo Methods Appl.*, 5(1):1–18, 1999.
- [6] H. Babovsky. On the mass discretization of the continuous Smoluchowski equation. Preprint M26, Technische Universität Ilmenau, 1999.
- [7] J. M. Ball and J. Carr. Coagulation-fragmentation dynamics. In *Dynamics of infinite-dimensional systems (Lisbon, 1986)*, volume 37 of *NATO Adv. Sci. Inst. Ser. F: Comput. Systems Sci.*, pages 23–30. Springer, Berlin, 1987.
- [8] J. M. Ball and J. Carr. The discrete coagulation-fragmentation equations: existence, uniqueness, and density conservation. *J. Statist. Phys.*, 61(1-2):203–234, 1990.
- [9] H. Bauer. *Maß- und Integrationstheorie*. de Gruyter Lehrbuch. [de Gruyter Textbook]. Walter de Gruyter & Co., Berlin, 1990.
- [10] R. Becker and W. Döring. Kinetische Behandlung der Keimbildung in übersättigten Dämpfen. *Ann. Physik*, 24:719–752, 1935.
- [11] L. Bergmann and C. Schaefer. *Lehrbuch der Experimentalphysik, Band 5, Vielteilchen-Systeme*. Walter de Gruyter, 1992.
- [12] P. Brémaud. *Point processes and queues*. Springer-Verlag, New York, 1981. Martingale dynamics, Springer Series in Statistics.
- [13] E. Buffet and J. V. Pulé. Polymers and random graphs. *J. Statist. Phys.*, 64(1-2):87–110, 1991.

- [14] J. Carr. Asymptotic behaviour of solutions to the coagulation-fragmentation equations. I. The strong fragmentation case. *Proc. Roy. Soc. Edinburgh Sect. A*, 121(3-4):231–244, 1992.
- [15] J. Carr and F. P. da Costa. Asymptotic behavior of solutions to the coagulation-fragmentation equations. II. Weak fragmentation. *J. Statist. Phys.*, 77(1-2):89–123, 1994.
- [16] M. F. Chen. *From Markov chains to nonequilibrium particle systems*. World Scientific Publishing Co. Inc., River Edge, NJ, 1992.
- [17] K. L. Chung. *Markov chains with stationary transition probabilities*. Springer-Verlag New York, Inc., New York, 1967. Second edition. Die Grundlehren der mathematischen Wissenschaften, Band 104.
- [18] F. P. da Costa. Existence and uniqueness of density conserving solutions to the coagulation-fragmentation equations with strong fragmentation. *J. Math. Anal. Appl.*, 192(3):892–914, 1995.
- [19] M. Deaconu, N. Fournier, and E. Tanré. A pure jump Markov process associated with Smoluchowski’s coagulation equation. Preprint 6, Université Henri Poincaré, Institut Élie Cartan, Nancy, 2001.
- [20] M. Deaconu, N. Fournier, and E. Tanré. Study of a stochastic particle system associated with Smoluchowski’s coagulation equation. Preprint 15, Université Henri Poincaré, Institut Élie Cartan, 2001.
- [21] Y. R. Domilovskiy, A. A. Lushnikov, and V. N. Piskurov. Monte Carlo simulation of coagulation processes. *Izv. Acad. Sci. USSR Atmospher. Ocean. Phys.*, 15(2):129–134, 1979.
- [22] R. L. Drake. A general mathematical survey of the coagulation equation. In G. Hidy and J. Brock, editors, *Topics in Current Aerosol Research (Part 2)*, pages 201–376. Pergamon Press, Oxford, 1972.
- [23] P. B. Dubovskii. *Mathematical theory of coagulation*, volume 23 of *Lecture Notes Series*. Seoul National University Research Institute of Mathematics Global Analysis Research Center, Seoul, 1994.
- [24] P. B. Dubovskii and I. W. Stewart. Existence, uniqueness and mass conservation for the coagulation-fragmentation equation. *Math. Methods Appl. Sci.*, 19(7):571–591, 1996.
- [25] R. Durrett, B. L. Granovsky, and S. Gueron. The equilibrium behavior of reversible coagulation-fragmentation processes. *J. Theoret. Probab.*, 12(2):447–474, 1999.
- [26] A. Eibeck and W. Wagner. Approximative solution of the coagulation-fragmentation equation by stochastic particle systems. *Stochastic Anal. Appl.*, 18(6):921–948, 2000.

- [27] A. Eibeck and W. Wagner. An efficient stochastic algorithm for studying coagulation dynamics and gelation phenomena. *SIAM J. Sci. Comput.*, 22(3):802–821 (electronic), 2000.
- [28] A. Eibeck and W. Wagner. Stochastic particle approximations for Smoluchowski’s coagulation equation. Technical Report 585, Weierstraß-Institut für Angewandte Analysis und Stochastik, Berlin, 2000. See <http://www.wias-berlin.de/publications/preprints/585>. To appear in *Ann. Appl. Probab.*
- [29] A. Eibeck and W. Wagner. Stochastic algorithms for studying coagulation dynamics and gelation phenomena. *Monte Carlo Methods Appl.*, 7(1-2):157–165, 2001. Monte Carlo and probabilistic methods for partial differential equations (Monte Carlo, 2000).
- [30] P. Erdős and A. Rényi. On the evolution of random graphs. *Magyar Tud. Akad. Mat. Kutató Int. Közl.*, 5:17–61, 1960.
- [31] M. Ernst and G. Szamel. Fragmentation kinetics. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 26:6085–6091, 1993.
- [32] M. Escobedo, S. Mischler, and B. Perthame. Gelation in coagulation and fragmentation models. Preprint 19, Département de mathématiques et applications - École normale supérieure, Paris, 2001.
- [33] S. N. Ethier and T. G. Kurtz. *Markov processes*. Wiley Series in Probability and Mathematical Statistics: Probability and Mathematical Statistics. John Wiley & Sons Inc., New York, 1986. Characterization and convergence.
- [34] A. F. Filippov. On the distribution of the sizes of particles which undergo splitting. *Theory Probab. Appl.*, 6(3):275–294, 1961.
- [35] G. S. Fishman. *Monte Carlo*. Springer-Verlag, New York, 1996. Concepts, algorithms, and applications.
- [36] P. J. Flory. Molecular size distribution in three dimensional polymers III. Tetrafunctional branching units. *J. Am. Chem. Soc.*, 63:3096–3100, 1941.
- [37] H. Gajewski. On a first order partial differential equation with nonlocal nonlinearity. *Math. Nachr.*, 111:289–300, 1983.
- [38] V. A. Galkin and P. B. Dubovskii. Solutions of a coagulation equation with unbounded kernels. *Differential Equations*, 22(3):373–378, 1986.
- [39] A. J. Garcia, C. Van den Broeck, M. Aertsens, and R. Serneels. A Monte Carlo simulation of coagulation. *Phys. A*, 143:535–546, 1987.
- [40] D. N. Gillespie. The stochastic coalescence model for cloud droplet growth. *J. Atmospheric Sci.*, 29:1496–1510, 1972.
- [41] D. N. Gillespie. An exact method for numerically simulating the stochastic coalescence process in a cloud. *J. Atmospheric Sci.*, 32:1977–1989, 1975.

- [42] C. P. Grünfeld. Nonlinear kinetic models with chemical reactions. In *Modeling in applied sciences*, pages 173–224. Birkhäuser Boston, Boston, MA, 2000.
- [43] S. Gueron. The steady-state distributions of coagulation-fragmentation processes. *J. Math. Biol.*, 37(1):1–27, 1998.
- [44] F. Guiaş. A Monte Carlo approach to the Smoluchowski equations. *Monte Carlo Methods Appl.*, 3(4):313–326, 1997.
- [45] F. Guiaş. Coagulation-fragmentation processes: relations between finite particle models and differential equations. Technical Report 41, Interdisziplinäres Zentrum für wissenschaftliches Rechnen der Universität Heidelberg (SFB 359), Heidelberg, 1998.
- [46] F. Guiaş. A direct simulation method for the coagulation-fragmentation equations with multiplicative coagulation kernels. *Monte Carlo Methods Appl.*, 5(4):287–309, 1999.
- [47] K. Hamza and F. C. Klebaner. Conditions for integrability of Markov chains. *J. Appl. Probab.*, 32(2):541–547, 1995.
- [48] O. J. Heilmann. Analytical solutions of Smoluchowski’s coagulation equation. *J. Phys. A*, 25(13):3763–3771, 1992.
- [49] E. M. Hendriks, M. H. Ernst, and R. M. Ziff. Coagulation equations with gelation. *J. Statist. Phys.*, 31(3):519–563, 1983.
- [50] I. Jeon. Existence of gelling solutions for coagulation-fragmentation equations. *Comm. Math. Phys.*, 194(3):541–567, 1998.
- [51] I. Jeon. Spouge’s conjecture on complete and instantaneous gelation. *J. Statist. Phys.*, 96(5-6):1049–1070, 1999.
- [52] G. Kersting and F. C. Klebaner. Sharp conditions for nonexplosions and explosions in Markov jump processes. *Ann. Probab.*, 23(1):268–272, 1995.
- [53] G. Kersting and F. C. Klebaner. Explosions in Markov processes and submartingale convergence. In *Athens Conference on Applied Probability and Time Series Analysis, Vol. I (1995)*, pages 127–136. Springer, New York, 1996.
- [54] J. F. C. Kingman. The coalescent. *Stochastic Process. Appl.*, 13(3):235–248, 1982.
- [55] W. Koch. *Über die Koagulation von Aerosolen und ihre Bedeutung für Umwelt und Verfahrenstechnik*. Habilitationsschrift, TU Clausthal, 94.
- [56] N. J. Kokholm. On Smoluchowski’s coagulation equation. *J. Phys. A*, 21(3):839–842, 1988.
- [57] A. Kolodko, K. Sabelfeld, and W. Wagner. A stochastic method for solving Smoluchowski’s coagulation equation. *Math. Comput. Simulation*, 49(1-2):57–79, 1999.

- [58] A. A. Kolodko and W. Wagner. Convergence of a Nanbu type method for the Smoluchowski equation. *Monte Carlo Methods Appl.*, 3(4):255–273, 1997. no com.
- [59] K. P. Koutzenogii, A. I. Levykin, and K. K. Sabelfeld. Numerical simulation of the kinetics of aerosol formation in the free molecular collision regime. *Journal of Aerosol Science*, 27(5):665–679, 1996.
- [60] R. Lang and X. X. Nguyen. Smoluchowski’s theory of coagulation in colloids holds rigorously in the Boltzmann–Grad limit. *Z. Wahrsch. Verw. Gebiete*, 54:227–280, 1980.
- [61] P. Laurençot. Global solutions to the discrete coagulation equations. *Mathematika*, 46(2):433–442, 1999.
- [62] P. Laurençot. On a class of continuous coagulation-fragmentation equations. *J. Differential Equations*, 167(2):245–274, 2000.
- [63] P. Laurençot. Occurrence of gelation and temporal decay estimates for the coagulation equation. Vortrag am Mathematischen Forschungsinstitut Oberwolfach, August 2001.
- [64] F. Leyvraz and H. R. Tschudi. Singularities in the kinetics of coagulation processes. *J. Phys. A*, 14(12):3389–3405, 1981.
- [65] F. Leyvraz and H. R. Tschudi. Critical kinetics near gelation. *J. Phys. A*, 15(6):1951–1964, 1982.
- [66] K. Liffman. A direct simulation Monte Carlo method for cluster coagulation. *J. Comput. Phys.*, 100:116–127, 1992.
- [67] E. Longo and N. Bellomo. The Boltzmann equation for dissipative disparate mixtures. *Appl. Math. Lett.*, 12(6):71–76, 1999.
- [68] A. A. Lushnikov. Some new aspects of coagulation theory. *Izv. Akad. Nauk SSSR Ser. Fiz. Atmosfer. i Okeana*, 14(10):738–743, 1978.
- [69] A. H. Marcus. Stochastic coalescence. *Technometrics*, 10(1):133–148, 1968.
- [70] D. J. McLaughlin, W. Lamb, and A. C. McBride. A semigroup approach to fragmentation models. *SIAM J. Math. Anal.*, 28(5):1158–1172, 1997.
- [71] J. B. McLeod. On an infinite set of non-linear differential equations. *Quart. J. Math. Oxford Ser. (2)*, 13:119–128, 1962.
- [72] J. B. McLeod. On an infinite set of non-linear differential equations. II. *Quart. J. Math. Oxford Ser. (2)*, 13:193–205, 1962.
- [73] P. Meakin. Aggregation kinetics. *Physica Scripta*, 46(6):295–331, 1991.
- [74] Z. A. Melzak. A scalar transport equation. *Trans. Amer. Math. Soc.*, 85:547–560, 1957.

- [75] J. R. Norris. Smoluchowski's coagulation equation: uniqueness, nonuniqueness and a hydrodynamic limit for the stochastic coalescent. *Ann. Appl. Probab.*, 9(1):78–109, 1999.
- [76] J. R. Norris. Cluster coagulation. *Comm. Math. Phys.*, 209(2):407–435, 2000.
- [77] K. K. Sabelfeld. Stochastic models for coagulation of aerosol particles in intermittent turbulent flows. *Math. Comput. Simulation*, 47(2-5):85–101, 1998.
- [78] K. K. Sabelfeld and A. A. Kolodko. Monte Carlo simulation of the coagulation processes governed by Smoluchowski equation with random coefficients. *Monte Carlo Methods Appl.*, 3(4):275–311, 1997.
- [79] K. K. Sabelfeld, S. V. Rogazinskii, A. A. Kolodko, and A. I. Levykin. Stochastic algorithms for solving Smoluchowski coagulation equation and applications to aerosol growth simulation. *Monte Carlo Methods Appl.*, 2(1):41–87, 1996.
- [80] P. Saffman and J. S. Turner. On the collision of drops in turbulent clouds. *J. Fluid Mech.*, 1:16–30, 1956.
- [81] M. Seeßelberg. *Über einige Weiterentwicklungen von Simulationsverfahren für stochastische Prozesse*. PhD thesis, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, 1995.
- [82] J. H. Seinfeld and S. N. Pandis. *Atmospheric chemistry and physics*. John Wiley & Sons Inc., 1998.
- [83] M. Slemrod. The Becker-Döring equations. In *Modeling in applied sciences*, pages 149–171. Birkhäuser Boston, Boston, MA, 2000.
- [84] D. J. Smit, M. J. Hounslow, and W. R. Paterson. Aggregation and gelation - I. Analytical solutions for CST and batch operation. *Chem. Eng. Sc.*, 49(7):1025–1035, 1994.
- [85] G. Spiga. Rigorous solution to the extended kinetic equations for homogeneous gas mixtures. In *Mathematical aspects of fluid and plasma dynamics (Salice Terme, 1988)*, volume 1460 of *Lecture Notes in Math.*, pages 203–221. Springer, Berlin, 1991.
- [86] J. L. Spouge. An existence theorem for the discrete coagulation-fragmentation equations. II. Inclusion of source and efflux terms. *Math. Proc. Cambridge Philos. Soc.*, 98(1):183–185, 1985.
- [87] J. L. Spouge. Monte Carlo results for random coagulation. *J. Colloid Interface Sci.*, 107(1):38–43, 1985.
- [88] I. W. Stewart. A global existence theorem for the general coagulation-fragmentation equation with unbounded kernels. *Math. Methods Appl. Sci.*, 11(5):627–648, 1989.
- [89] I. W. Stewart. A uniqueness theorem for the coagulation-fragmentation equation. *Math. Proc. Cambridge Philos. Soc.*, 107(3):573–578, 1990.

- [90] W. H. Stockmayer. Theory of molecular size distribution and gel formation in branched chain polymers. *J. Chem. Phys.*, 11:45–55, 1943.
- [91] P. G. J. van Dongen and M. H. Ernst. Fluctuations in coagulating systems. *J. Statist. Phys.*, 49(5-6):879–926, 1987.
- [92] T. Vicsek. *Fractal growth phenomena*. World Scientific Publishing Co. Inc., Teaneck, NJ, 1989. With a foreword by Benoit B. Mandelbrot.
- [93] B. von Querenburg. *Mengentheoretische Topologie*. Springer-Verlag, Berlin, second edition, 1979. Hochschultext. [University Text].
- [94] M. von Smoluchowski. Drei Vorträge über Diffusion, Brownsche Molekularbewegung und Koagulation von Kolloidteilchen. *Phys. Z.*, 17:557–571, 585–599, 1916.
- [95] M. von Smoluchowski. Versuch einer mathematischen Theorie der Koagulationskinetik kolloider Lösungen. *Z. Phys. Chem.*, 92:129–168, 1917.
- [96] W. Wagner. A functional law of large numbers for Boltzmann type stochastic particle systems. *Stochastic Anal. Appl.*, 14(5):591–636, 1996.
- [97] W. H. White. A global existence theorem for Smoluchowski’s coagulation equations. *Proc. Amer. Math. Soc.*, 80(2):273–276, 1980.
- [98] M. M. R. Williams and S. K. Loyalka. *Aerosol Science. Theory and Practice*. Pergamon, New York, 1991.
- [99] R. M. Ziff. Kinetics of polymerization. *J. Statist. Phys.*, 23(2):241–263, 1980.
- [100] R. M. Ziff. An explicit solution to a discrete fragmentation model. *J. Phys. A*, 25(9):2569–2576, 1992.
- [101] R. M. Ziff and E. D. McGrady. Kinetics of polymer degradation. *Macromolecules*, 19:2513–2519, 1986.
- [102] R. M. Ziff and G. Stell. Kinetics of polymer gelation. *J. Chem. Phys.*, 73(7):3492–3499, 1980.

Anhang A

Skorohod-Raum und Meßbarkeit

Lemma A.1 ([33, Proposition 3.5.3 und Bemerkung 3.5.4]) Sei (E, d) ein metrischer Raum und $\xi_n, \xi \in D([0, \infty), E)$. ξ_n konvergiert gegen ξ bzgl. der Skorohod-Topologie genau dann, wenn es für jedes $T > 0$ streng steigende, bijektive Funktionen $\lambda_n : [0, \infty) \rightarrow [0, \infty)$ gibt, so dass

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sup_{0 \leq t \leq T} |\lambda_n(t) - t| = 0 \quad \text{und} \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \sup_{0 \leq t \leq T} d(\xi_n(\lambda_n(t)), \xi(t)) = 0. \quad (\text{A.1})$$

Lemma A.2 Sei E ein metrischer Raum, $\xi \in D([0, \infty), E)$ und $T \geq 0$. Dann ist

$$C = \{\xi(t), \xi(t-) : 0 \leq t \leq T\} \quad (\text{A.2})$$

kompakt.

Beweis. Jede Folge t_k aus $[0, T]$ besitzt mindestens einen Häufungspunkt t , $0 \leq t \leq T$, und es gibt eine Teilfolge t_{k_n} , die gegen t konvergiert und entweder monoton steigend oder monoton fallend ist. Da ξ ein cadlag-Pfad ist, konvergiert $\xi(t_{k_n})$ gegen $\xi(t-)$ oder $\xi(t)$. Das gleiche gilt für die Folge $\xi(t_{k_n}-)$. Dies zeigt, dass jede Folge aus C eine in C konvergente Teilfolge besitzt, d.h., dass C kompakt ist. \square

Lemma A.3

(1) (E, d) und (E_2, d_2) seien metrische Räume. Ist $f : E \rightarrow E_2$ stetig, so ist die Abbildung

$$F : D([0, \infty), E) \rightarrow D([0, \infty), E_2), \quad F(\xi)(t) = f(\xi(t))$$

stetig.

(2) Die Abbildung

$$G : D([0, \infty), \mathbb{R}) \rightarrow D([0, \infty), \mathbb{R}), \quad G(\xi)(t) = \int_0^t \xi(s) \, ds$$

ist stetig.

Beweis. (1) $\xi_n \in D([0, \infty), E)$ konvergiere gegen ξ bzgl. der Skorohod-Topologie. Sei $T > 0$. Wir wählen λ_n gemäß Lemma A.1. Um die Konvergenz von $F(\xi_n)$ gegen $F(\xi)$ bzgl. der Skorohod-Topologie zu zeigen, ist es genug

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sup_{0 \leq t \leq T} d_2(f(\xi_n(\lambda_n(t))), f(\xi(t))) = 0 \quad (\text{A.3})$$

für dieselben Funktionen λ_n zu zeigen. Sei $\epsilon > 0$ und C die kompakte Menge (A.2). Da f stetig ist, gibt es zu jedem $x \in C$ ein $\delta(x) > 0$, so dass

$$d_2(f(y), f(x)) \leq \frac{\epsilon}{2}, \quad y \in B(x, \delta(x)), \quad (\text{A.4})$$

wobei $B(x, \delta) = \{z \in E : d(x, z) < \delta\}$. Aus der Kompaktheit von C folgt die Existenz von Elementen $x_1, \dots, x_m \in C$, für die

$$C \subset \bigcup_{i=1}^m B(x_i, \delta(x_i)/2). \quad (\text{A.5})$$

Gemäß (A.1) gibt es ein $N \geq 1$, so dass

$$\sup_{0 \leq t \leq T} d(y_n(t), \xi(t)) \leq \min_{1 \leq i \leq m} \delta(x_i)/2, \quad n \geq N,$$

wobei $y_n(t) = \xi_n(\lambda_n(t))$. Nach (A.5) läßt sich zu jedem $t \in [0, T]$ ein Index i , $1 \leq i \leq m$, wählen, für den $\xi(t) \in B(x_i, \delta(x_i)/2)$ und somit $y_n(t) \in B(x_i, \delta(x_i))$, $n \geq N$, gilt. Aus (A.4) folgt

$$d_2(f(y_n(t)), f(\xi(t))) \leq d_2(f(y_n(t)), f(x_i)) + d_2(f(x_i), f(\xi(t))) \leq \epsilon \quad (\text{A.6})$$

und schließlich (A.3).

(2) $\xi_n \in D([0, \infty), \mathbb{R})$ konvergiere gegen ξ bzgl. der Skorohod-Topologie. Dann konvergiert $\xi_n(t)$ gegen $\xi(t)$ für fast jedes t und für $T > 0$ gilt $\sup_n \sup_{t \leq T} |\xi_n(t)| < \infty$. Aus

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sup_{0 \leq t \leq T} \left| \int_0^t \xi_n(s) ds - \int_0^t \xi(s) ds \right| \leq \lim_{n \rightarrow \infty} \int_0^T |\xi_n(s) - \xi(s)| ds = 0$$

und Lemma A.1 folgt die Konvergenz von $G(\xi_n)$ gegen $G(\xi)$ bzgl. der Skorohod-Topologie. \square

Sei E eine beliebige Menge. Ein System \mathcal{D} von Teilmengen aus E heißt Dynkin-System, falls $E \in \mathcal{D}$, $A^c \in \mathcal{D}$ für jedes $A \in \mathcal{D}$ und $\bigcup_m A_m \in \mathcal{D}$ für jede Folge paarweise disjunkter $A_m \in \mathcal{D}$, $m \geq 1$. Für ein beliebiges System \mathcal{E} von Teilmengen aus E bezeichne $\delta(\mathcal{E})$ das von \mathcal{E} erzeugte Dynkin-System und $\sigma(\mathcal{E})$ die von \mathcal{E} erzeugte σ -Algebra.

Theorem A.4 ([9, Theorem 2.4]) Für das System \mathcal{E} von Teilmengen aus E gelte $A \cap B \in \mathcal{E}$ für alle $A, B \in \mathcal{E}$. Dann ist $\delta(\mathcal{E}) = \sigma(\mathcal{E})$.

Lemma A.5 (E, \mathcal{B}) und (E_2, \mathcal{B}_2) seien meßbare Räume und $\lambda : E \times \mathcal{B}_2 \rightarrow [0, \infty)$ sei ein Kern von E nach E_2 . Die Funktion $g : E \times E_2 \rightarrow \mathbb{R}$ sei $\mathcal{B} \otimes \mathcal{B}_2$ - $\mathcal{B}(\mathbb{R})$ -meßbar und es gelte $\int_{E_2} |g(\xi, \xi_2)| \lambda(\xi, d\xi_2) < \infty$, $\xi \in E$. Dann ist

$$G : E \rightarrow \mathbb{R}, \quad G(\xi) = \int_{E_2} g(\xi, \xi_2) \lambda(\xi, d\xi_2)$$

meßbar.

Beweis. Nach [9, Lemma 23.1] gilt für $B \in \mathcal{B} \otimes \mathcal{B}_2$ und $\xi \in E$

$$B_\xi := \{\xi_2 \in E_2 : (\xi, \xi_2) \in B\} \in \mathcal{B}_2.$$

Das Sytem

$$\mathcal{D} = \{B \in \mathcal{B} \otimes \mathcal{B}_2 : \lambda(\xi, B_\xi) \in M(E)\}$$

besitzt folgende Eigenschaften: \mathcal{D} enthält alle Mengen $B = A \times A_2$, $A \in \mathcal{B}$, $A_2 \in \mathcal{B}_2$, da

$$\lambda(\xi, B_\xi) = 1_A(\xi) \lambda(\xi, A_2). \quad (\text{A.7})$$

Insbesondere liegt $E \times E_2$ in \mathcal{D} . Für jedes $B \in \mathcal{D}$ gilt $B^c \in \mathcal{D}$, da

$$\lambda(\xi, (B^c)_\xi) = \lambda(\xi, E_2) - \lambda(\xi, B_\xi).$$

Für die Vereinigung B paarweise disjunkter Mengen $B_n \in \mathcal{D}$, $n \geq 1$, folgt

$$\lambda(\xi, B_\xi) = \sum_n \lambda(\xi, (B_n)_\xi),$$

also $B \in \mathcal{D}$. Damit ist \mathcal{D} ein Dynkin-System und aus (A.7) ergibt sich

$$\delta(\mathcal{E}) \subset \mathcal{D} \subset \mathcal{B} \otimes \mathcal{B}_2, \quad (\text{A.8})$$

wobei $\mathcal{E} = \{A \times A_2 : A \in \mathcal{B}, A_2 \in \mathcal{B}_2\}$. Weiterhin gilt für $A, \hat{A} \in \mathcal{B}$ und $A_2, \hat{A}_2 \in \mathcal{B}_2$

$$(A \times A_2) \cap (\hat{A} \times \hat{A}_2) = (A \cap \hat{A}) \times (A_2 \cap \hat{A}_2) \in \mathcal{E}.$$

Aus Theorem A.4 folgt $\delta(\mathcal{E}) = \sigma(\mathcal{E}) = \mathcal{B} \otimes \mathcal{B}_2$ und aus (A.8)

$$\int_{E_2} 1_B(\xi, \xi_2) \lambda(\xi, d\xi_2) = \lambda(\xi, B_\xi) \in M(E), \quad B \in \mathcal{B} \otimes \mathcal{B}_2. \quad (\text{A.9})$$

Für die meßbare Funktion $g : E \times E_2 \rightarrow [0, \infty)$ gelte nun $\int_{E_2} g(\xi, \xi_2) \lambda(\xi, d\xi_2) < \infty$, $\xi \in E$. Nach [9, Theorem 11.6] gibt es eine Folge

$$g_n \in \left\{ \sum_{i=1}^k c_i 1_{B_i} : k \geq 1, c_i \geq 0, B_i \in \mathcal{B} \otimes \mathcal{B}_2, 1 \leq i \leq k \right\},$$

so dass $g_n \uparrow g$. Aus (A.9) und

$$G(\xi) = \int_{E_2} g(\xi, \xi_2) \lambda(\xi, d\xi_2) = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{E_2} g_n(\xi, \xi_2) \lambda(\xi, d\xi_2)$$

erhalten wir die Meßbarkeit von G . Die Meßbarkeit im Fall $g : E \times E_2 \rightarrow \mathbb{R}$ ergibt sich schließlich aus der Zerlegung der Funktion g in ihren Positiv- und Negativteil. \square

Lemma A.6 Sei (E, d) ein metrischer Raum und X ein E -wertiger $\{\mathcal{F}_t\}$ -adaptierter cadlag-Prozeß. Falls Ψ und $\Phi \in M(E)$ beschränkt auf kompakten Mengen sind, so ist der Prozeß

$$Y(t) = \Psi(X(t)) - \int_0^t \Phi(X(s)) ds \quad (\text{A.10})$$

$\{\mathcal{F}_t\}$ -adaptiert und es gilt

$$\sup_{s \leq t} |Y(\omega, s)| < \infty, \quad \omega \in \Omega, \quad t \geq 0. \quad (\text{A.11})$$

Beweis. Sei $t \geq 0$. Zu $\Phi \in M(E)$ definieren wir

$$g_\Phi : \Omega \times [0, t] \rightarrow \mathbb{R}, \quad g_\Phi(\omega, s) = \Phi(X(\omega, s)).$$

Für $\Phi \in C(E)$ ist $\Phi(X(t))$ ein cadlag-Prozeß und g_Φ nach [33, S.50] $\mathcal{F}_t \otimes \mathcal{B}([0, t])$ - $\mathcal{B}(\mathbb{R})$ -meßbar. Wir zeigen nun, dass dies auch für $\Phi \in M(E)$ der Fall ist. Offensichtlich ist

$$\mathcal{D} = \{B \in \mathcal{B}(E) : g_{1_B} \text{ ist meßbar}\}$$

ein Dynkin-System. Bezeichne \mathcal{C} das System aller abgeschlossenen Teilmengen von E . Zu jedem $C \in \mathcal{C}$ läßt sich unter Verwendung von [93, Theorem 1.32] eine Folge $\Phi_n \in C(E)$ konstruieren, die punktweise gegen 1_C konvergiert. Somit folgt

$$\delta(\mathcal{C}) \subset \mathcal{D} \subset \mathcal{B}(E)$$

und aus Theorem A.4 die Gleichheit $\mathcal{D} = \mathcal{B}(E)$. Für $\Phi \in M(E)$ ergibt sich schließlich die Meßbarkeit von g_Φ durch geeignete Approximation von Φ mittels Stufenfunktionen.

Seien nun Ψ und $\Phi \in M(E)$ beschränkt auf kompakten Mengen. Aus Lemma A.2 folgt

$$\sup_{s \leq t} |\Psi(X(\omega, s))| + \int_0^s |\Phi(X(\omega, u))| du < \infty, \quad \omega \in \Omega,$$

d.h., es gilt (A.11), und aus Lemma A.5 erhalten wir unmittelbar, dass $Y(t)$ \mathcal{F}_t -meßbar ist. \square

Lemma A.7 Sei \mathcal{Z} metrisch, separabel und lokal-kompakt. Sei $r, N \geq 1$ und E^N gegeben durch (1.31). Dann wird durch

$$\Lambda_r(\mu, B) = \int_{\mathcal{Z}} \dots \int_{\mathcal{Z}} 1_B(x_1, \dots, x_r) \mu(dx_1) \dots \mu(dx_r) \quad (\text{A.12})$$

ein Kern von E^N nach \mathcal{Z}^r definiert.

Beweis. Offensichtlich gilt $\Lambda_r(\mu, \cdot) \in \mathcal{M}_b(\mathcal{Z}^r)$ für jedes $\mu \in E^N$ und ist

$$\mathcal{D} = \{B \in \mathcal{B}(\mathcal{Z}^r) : \Lambda_r(\cdot, B) \in M(E^N)\}$$

ein Dynkin-System. Sei $\Gamma \in \mathcal{C}$, wobei \mathcal{C} das System aller abgeschlossenen Teilmengen von \mathcal{Z}^r bezeichne. Unter Verwendung von [93, Theorem 1.32] können wir Funktionen $\varphi_n \in C_b(\mathcal{Z}^r)$ derart wählen, dass $0 \leq \varphi_n \leq 1$ und φ_n punktweise gegen 1_Γ konvergiert. Somit erhalten wir

$$\Phi_n(\mu) := \int_{\mathcal{Z}} \dots \int_{\mathcal{Z}} \varphi_n(x_1, \dots, x_r) \mu(dx_1) \dots \mu(dx_r) \rightarrow \Lambda_r(\mu, \Gamma), \quad \mu \in E^N,$$

und da $\Phi_n \in C(E^N)$, ist $\Lambda_r(\cdot, \Gamma)$ meßbar, d.h. $\Gamma \in \mathcal{D}$. Hieraus ergibt sich

$$\delta(\mathcal{C}) \subset \mathcal{D} \subset \mathcal{B}(\mathcal{Z}^r).$$

Theorem A.4 liefert schließlich $\mathcal{D} = \mathcal{B}(\mathcal{Z}^r)$, womit bewiesen ist, dass durch (A.12) ein Kern von E^N nach \mathcal{Z}^r definiert wird. \square

Lemma A.8 *Sei \mathcal{Z} metrisch, separabel und lokal-kompakt. Sei $N \geq 1$ und E^N gegeben durch (1.31). Falls Bedingung (1.33) erfüllt ist, so gibt es einen kompakt-beschränkten Kern λ^N auf E^N , so dass für jedes $\mu \in E^N$ und $\Psi \in C_b(E^N)$ (siehe (1.34), (1.35))*

$$\begin{aligned} & \int_{E^N} [\Psi(\mu_2) - \Psi(\mu)] \lambda^N(\mu, d\mu_2) \\ &= N \int_{\Xi} [\Psi(J_0(\mu, \xi)) - \Psi(\mu)] \lambda_0(d\xi) + \sum_{i=1}^n \int_{\Xi} [\Psi(J_1(\mu, x_i, \xi)) - \Psi(\mu)] \lambda_1(x_i, d\xi) \\ & \quad + \frac{1}{2N} \sum_{1 \leq i \neq j \leq n} \int_{\Xi} [\Psi(J_2(\mu, x_i, x_j, \xi)) - \Psi(\mu)] \lambda_2(x_i, x_j, d\xi). \end{aligned} \tag{A.13}$$

Beweis. Wir definieren $\lambda^N : E^N \times \mathcal{B}(E^N) \rightarrow [0, \infty]$ durch

$$\begin{aligned} \lambda^N(\mu, B) &= N \int_{\Xi} 1_B(J_0(\mu, \xi)) \lambda_0(d\xi) + \sum_{i=1}^n \int_{\Xi} 1_B(J_1(\mu, x_i, \xi)) \lambda_1(x_i, d\xi) \\ & \quad + \frac{1}{2N} \sum_{1 \leq i \neq j \leq n} \int_{\Xi} 1_B(J_2(\mu, x_i, x_j, \xi)) \lambda_2(x_i, x_j, d\xi). \end{aligned}$$

Offensichtlich gilt $\lambda^N(\mu, \cdot) \in \mathcal{M}_b(E^N)$ für jedes $\mu \in E^N$ und λ^N erfüllt (A.13) für jedes $\Psi \in C_b(E^N)$. Sei $B \in \mathcal{B}(E^N)$. Wir zeigen nun, dass $\lambda^N(\cdot, B)$ meßbar ist. Die Terme $1_B(J_0(\mu, \xi))$, $1_B(J_1(\mu, x, \xi))$ und $1_B(J_2(\mu, x, y, \xi))$ definieren meßbare Funktionen auf $E^N \times \Xi$, $E^N \times \mathcal{Z} \times \Xi$ bzw. $E^N \times \mathcal{Z} \times \mathcal{Z} \times \Xi$ und Lemma A.5 liefert die Meßbarkeit der Funktionen

$$\begin{aligned} g_0(\mu) &= \int_{\Xi} 1_B(J_0(\mu, \xi)) \lambda_0(d\xi), \\ g_1(\mu, x) &= \int_{\Xi} 1_B(J_1(\mu, x, \xi)) \lambda_1(x, d\xi) \quad \text{und} \\ g_2(\mu, x, y) &= \int_{\Xi} 1_B(J_2(\mu, x, y, \xi)) \lambda_2(x, y, d\xi). \end{aligned}$$

Die durch Lemma A.7 gegebenen Kerne Λ_1 und Λ_2 führen zu der Darstellung

$$\begin{aligned}\lambda^N(\mu, B) &= N \left[g_0(\mu) + \int_{\mathcal{Z}} g_1(\mu, x) \Lambda_1(\mu, dx) + \frac{1}{2} \int_{\mathcal{Z} \times \mathcal{Z}} g_2(\mu, x, y) \Lambda_2(\mu, d(x, y)) \right] \\ &\quad - \frac{1}{2} \int_{\mathcal{Z}} g_2(\mu, x, x) \Lambda_1(\mu, dx) .\end{aligned}$$

Aus Lemma A.5 ergibt sich die Meßbarkeit von $\lambda^N(\cdot, B)$ und somit ist λ^N ein Kern auf E^N .

Es bleibt zu zeigen, dass λ^N kompakt-beschränkt ist. Dazu wählen wir gemäß Theorem 1.5 kompakte und offene Mengen $\Gamma_m, \Omega_m \subset \mathcal{Z}$, $m \geq 1$, so dass $\Gamma_m \subset \Omega_m \subset \Gamma_{m+1}$ und $\mathcal{Z} = \bigcup_m \Gamma_m$. Mithilfe der Bemerkung 1.16 läßt sich leicht zeigen, dass die Mengen

$$C_m = \left\{ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n \delta_{x_i} : 0 \leq n \leq m, x_i \in \Gamma_m, i = 1, \dots, n \right\}$$

und

$$O_m = \left\{ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n \delta_{x_i} : 0 \leq n \leq m, x_i \in \Omega_m, i = 1, \dots, n \right\}$$

kompakt bzw. offen bzgl. der schwachen Topologie sind. Außerdem gilt $C_m \subset O_m \subset C_{m+1}$ und $E^N = \bigcup_m C_m$. Zu jeder kompakten Menge $C \subset E^N$ gibt es also ein m , für das $C \subset C_m$, und aus Voraussetzung (1.33) folgt

$$\sup_{\mu \in C} \lambda^N(\mu, E^N) \leq N \lambda_0(\Xi) + m \sup_{x \in \Gamma_m} \lambda_1(x, \Xi) + \frac{m^2}{2N} \sup_{x, y \in \Gamma_m} \lambda_2(x, y, \Xi) < \infty .$$

□

Lebenslauf

Andreas Eibeck

geboren am 12.3.1970 in Moers

- 08/1976 - 07/1980 Geschwister-Scholl-Schule (Großkrotzenburg)
- 08/1980 - 05/1989 Franziskanergymnasium Kreuzburg (Großkrotzenburg) mit Abschluß Abitur
- 06/1989 - 09/1990 Zivildienst
- 10/1990 - 06/1997 Studium der Mathematik mit Nebenfach Informatik an der Johann Wolfgang Goethe-Universität in Frankfurt
- 10/1992 Vordiplom
- 06/1997 Diplom in Mathematik mit Nebenfach Informatik
(Diplomarbeit bei Prof. Dr. Kersting zum Thema „Diffusionsapproximation eines Wachstumsmodells“)
- 10/1997 - 09/2001 wissenschaftliche Mitarbeit am Weierstraß-Institut für Angewandte Analysis und Stochastik (WIAS) in Berlin,
DFG-Projekt: „Stochastische Partikelsysteme als numerische Verfahren für Probleme der Aerosoldynamik“ innerhalb des Schwerpunktprogramms „Interagierende stochastische Systeme von hoher Komplexität“ ,
Projektleitung: Priv.-Doz. Dr. Wagner (WIAS) und Prof. Dr. Babovsky (TU Ilmenau)
- 02/2000 - 07/2001 wissenschaftliche Mitarbeit am WIAS,
DFG-Projekt: „Effektive Steuerung von stochastischen Partikelverfahren für Strömungen in verdünnten Gasen“,
Projektleitung: Priv.-Doz. Dr. Wagner (WIAS) und Prof. Dr. Rjasanow (Universität des Saarlandes)

Selbständigkeitserklärung

Hiermit erkläre ich, die vorliegende Arbeit selbständig ohne fremde Hilfe verfaßt zu haben und nur die angegebene Literatur und Hilfsmittel verwendet zu haben.

Andreas Eibeck

13.11.2001